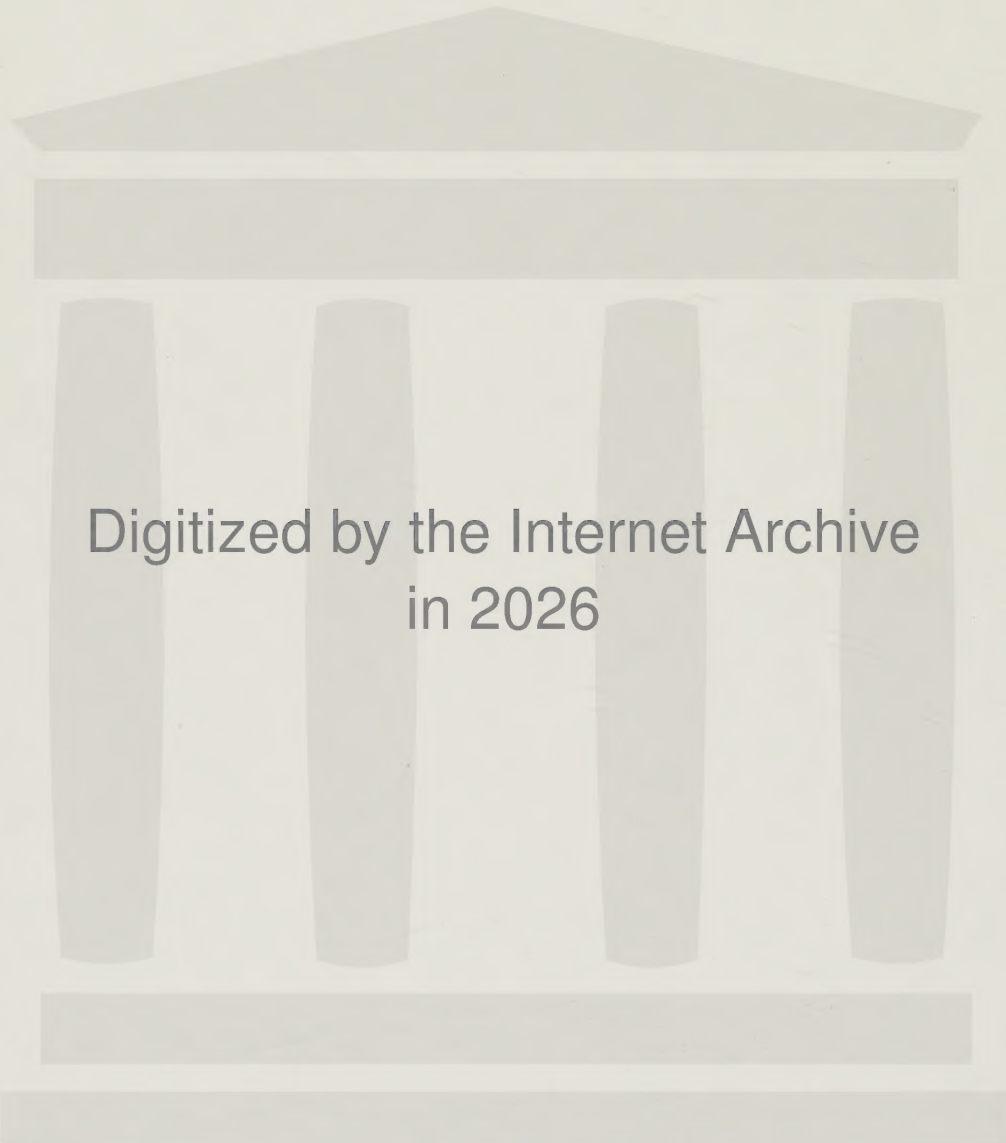


J Reinhardt

Frankfurt a M 1900



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0024

Dynamische Theorie der Erzeugung von Positronen
in Stößen sehr schwerer Ionen

Inaugural - Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der

Johann-Wolfgang-Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Joachim Reinhardt

aus Königstein im Taunus

Frankfurt am Main

1979



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik
der Johann-Wolfgang-Goethe - Universität
zu Frankfurt am Main

Dekan: Prof. Dr. W. Martienssen

Leiter der Arbeit: Prof. Dr. W. Greiner

Erstgutachter: Prof. Dr. W. Greiner

Zweitgutachter: Prof. Dr. B. Müller

Tag der mündlichen Prüfung: 8. 01. 80

Inhaltsverzeichnis

I)	<u>Einleitung</u>	1
II)	<u>Elektronische Anregungen im semiklassischen Modell</u>	
	1) Allgemeine Betrachtungen	12
	2) Die gekoppelten-Kanal-Gleichungen	16
	3) Die Einteilchenamplituden	24
III)	<u>Anregungen des Vielteilchensystems</u>	
	1) Teilchen- und Lochanregung im Formalismus der zweiten Quantisierung	29
	2) Korrelationen in der Teilchen- und Lochanregung	35
	3) Stöße mit statistisch angeregtem Anfangszustand	38
IV)	<u>Wellenfunktionen und Matrixelemente</u>	
	1) Die Monopolnäherung	41
	2) Zur Berechnung der Wellenfunktionen	46
	3) Die radialen Matrixelemente	53
	4) Zur Wahl der adiabatischen Basis	60
V)	<u>Ein Modell für den überkritischen Zustand</u>	
	1) Der Autoionisations-Formalismus	66
	2) Spontane Positronenerzeugung im Autoionisationsmodell	68

VI)	<u>Dynamische Behandlung überkritischer Stöße</u>	
1)	Problemstellung	72
2)	Statisches Modell	73
3)	Diskretisierung des Kontinuums	75
4)	Verwendung der unterkritischen Basis	78
VII)	<u>Ein Projektionsverfahren für die überkritische Basis</u>	
1)	Die Grundidee	81
2)	Konstruktion der Projektionsbasis	82
3)	Wellenfunktionen und Matrixelemente	91
VIII)	<u>Numerische Ergebnisse : Störungstheorie</u>	
1)	Näherungen und Formulierung der Störungstheorie	104
2)	Ausgewählte Ergebnisse	110
IX)	<u>Numerische Ergebnisse : Gekoppelte-Kanal-Rechnungen</u>	
1)	Zur numerischen Methode	130
2)	K-Loch-Erzeugung: Die Rolle der Mehrstufenanregung	133
3)	Positronenerzeugung	144
4)	Vergleich mit dem Experiment	156
X)	<u>Stöße mit verlängerter Kontaktzeit der Kerne</u>	
1)	Kernreaktionen im Spiegel atomphysikalischer Anregungen	164
2)	Die nukleare Trajektorie in tief inelastischen Kernstößen	167
3)	Einfluß auf die Ionisation	171
4)	Einfluß auf die Positronenerzeugung	178

XI)	<u>Zusammenfassung</u>	186
-----	------------------------	-----

Anhang

A.	Multipolentwicklung der magnetischen Kopplung	189
B.	Beschreibung von Vielteilchenanregungen mittels Slaterdeterminanten	199
C.	Symmetrisierung der Positronenwahrscheinlichkeiten	203

	<u>Literaturverzeichnis</u>	206
--	-----------------------------	-----

Abstract

Collisions of very heavy ions with impact energies near the nuclear Coulomb barrier offer the opportunity to study the behaviour of electrons in strong external electromagnetic fields. In particular, in supercritical collisions with $Z_1 + Z_2 \gtrsim 172$ holes in the deepest bound state are predicted to submerge into the antiparticle continuum, leading to spontaneous emission of positrons.

To describe the dynamical behaviour of the electron-positron field the semiclassical model is reviewed and extended to describe excitations of the many-particle system. An expansion of the time dependent wavefunction in the molecular basis is chosen. Energies and coupling matrix elements are calculated using the monopole approximation. For the 1s-resonance in supercritical collisions a projector formalism is developed. Subsequently dynamical calculations are performed using first and second order perturbation theory and also numerically solving the coupled channel equations.

Due to the shrinkage of the wavefunctions in the combined Coulomb field of the colliding nuclei strong inner-shell and positron excitations are predicted. Multi-step excitation is found to increase the K-hole probabilities by up to a factor 5 compared to first order direct ionisation. Most of the calculated excitation rates are in close agreement with recent experiments.

Electronic excitations in collisions above the Coulomb barrier with prolonged time of nuclear contact are discussed as a means both to measure nuclear reaction times as well as to unambiguously identify the spontaneous emission of positrons in supercritical collisions.

I) Einleitung

In der vorliegenden Arbeit sollen die Anregungen der Elektronenhülle und speziell die Erzeugung von Positronen im Stoß von sehr schweren Ionen untersucht werden. Diesem Problem liegt eine fundamentale Fragestellung zugrunde, die seit langem mit Interesse verfolgt wird, aber erst in jüngster Zeit experimentellen Untersuchungen zugänglich wurde: Wie verhalten sich Elektronen in starken elektrischen Feldern? Wir geben im folgenden einen kurzen Überblick über die Entwicklung dieses Gebietes und die von der Theorie vorhergesagten Phänomene, um die Motivation für unsere Rechnungen klarzustellen. Ausführliche Darstellungen und eine vollständige Zusammenstellung der umfangreichen Literatur findet man in den Übersichtsartikeln Ref. 1) - 4).

Historisch hat das Gebiet der Quantenelektrodynamik (QED) starker Felder zwei Wurzeln: Die Spekulationen über superschwere Atome und das Klein'sche Paradoxon. Betrachten wir zunächst das Verhalten der Energieniveaus eines wasserstoffähnlichen Atoms mit großer Kernladung Z . Zur theoretischen Beschreibung dieses Systems ist in einem ersten Schritt die Diracgleichung mit einem externen Coulombpotential zu lösen. Das Lösungsspektrum umfaßt einen Satz von gebundenen Niveaus im Bereich $-mc^2 \leq E_n < mc^2$ und zwei Kontinua mit positiven und negativen "Energien" (eigentlich Frequenzen). Das untere Kontinuum kann am einfachsten im Sinne der Dirac'schen Löchertheorie ⁵⁾ interpretiert werden. In diesem Bild ist es normalerweise vollständig mit Elektronen aufgefüllt. Ein unbesetzter Zustand wirkt wie ein Teilchen mit positiver Ladung und positiver Energie und wird mit

einem Positron identifiziert.

Mit wachsender Kernladung sinkt die Energie der gebundenen Niveaus stetig ab. Im normal zugänglichen Bereich der stabilen Atome bleibt die Bindungsenergie klein gegen die Ruhmasse des Elektrons, $mc^2 = 511 \text{ keV}$. Unter Annahme eines punktförmigen Kerns folgt das Lösungsspektrum der Sommerfeld'schen Feinstrukturformel, für den am tiefsten gebundenen $1s$ -Zustand gilt z. B. $E_{1s} = mc^2 \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$. Bei $Z = 1/\alpha \approx 137$ werden die Ausdrücke für die Energien aller Zustände mit $\kappa = \pm 1$ (d. h. Drehimpuls $j = 1/2$) singulär und verschwinden mit senkrechter Tangente aus dem reellen Lösungsspektrum der Diracgleichung. Verschiedene Autoren⁶⁾⁻⁸⁾ haben erkannt, daß es sich um eine unphysikalische Singularität handelt, die bei Einführung einer endlichen Ausdehnung des Kerns verschwindet. In der Arbeit von Pieper und Greiner (Ref. 9) wurden die Energieniveaus der innersten Schalen überschwerer Atome erstmals systematisch untersucht und durch die Abschätzung der Vakuumpolarisation ein Grundstein zur Quantenelektrodynamik starker Felder gelegt. Das Ergebnis der Untersuchungen ist in Abb. 1 dargestellt. Alle Energien lassen sich stetig bis zum unteren Kontinuum verfolgen. Der $1s$ -Zustand erhält bei $Z > 150$ negative Gesamtenergie und erreicht bei $Z_{cr}^{(1s)} \approx 172$ den Wert $-mc^2$, der $2p_{1/2}$ -Zustand folgt bei $Z_{cr}^{(2p)} \approx 185$ (Abschirmungseffekte sind in diesen Werten schon berücksichtigt, vgl. Ref. 10). Beim Überschreiten von Z_{cr} ändert das Lösungsspektrum der Diracgleichung qualitativ seine Gestalt: Ein diskreter Zustand "taucht ein" in das untere Kontinuum und vermischt sich mit ihm, er wird zur Resonanz.

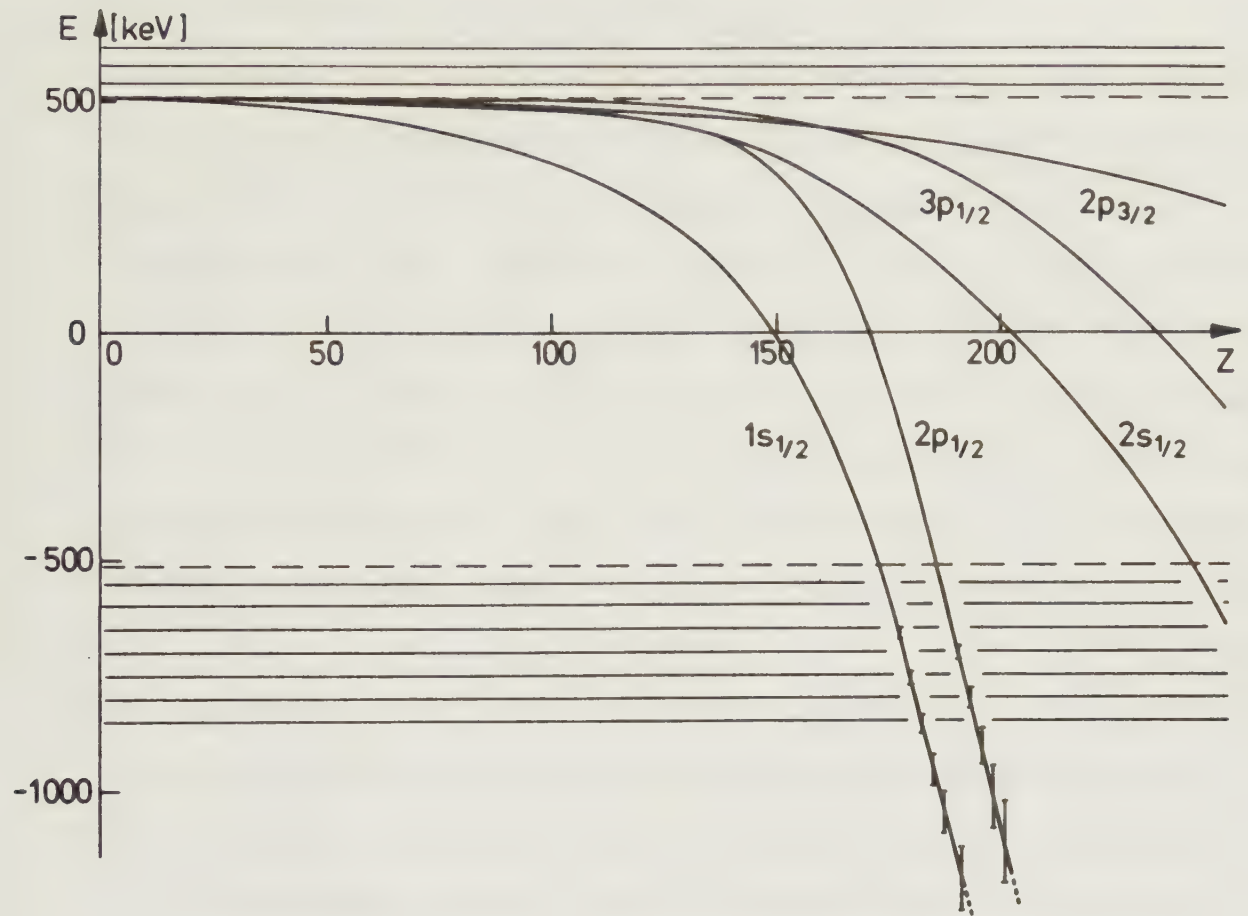


Abb. 1 : Das Lösungsspektrum der Diracgleichung im Feld eines ausgedehnten Kerns als Funktion der Kernladung Z (Nach Ref. 8). Gestrichelt: Energien im Feld eines Punktkerns.

Dies hat eine wichtige Konsequenz: Wird in einem Gedankenexperiment die Ladung eines nackten Kerns über die Grenze Z_{cr} erhöht, so kommt es zur spontanen Erzeugung von Positronen^{9),12)-15)} durch das starke elektrische Feld. Diese entweichen ins Unendliche, während das gebundene Niveau mit Elektronen gefüllt wird^(§). Energielose Paarerzeugung ist möglich, da die Bindungsenergie die Schwelle $2mc^2$ überschritten hat. Die Bedeutung dieses Effekts wurde von Rafelski, Müller und Greiner¹⁶⁾ und von Fulcher und Klein¹⁷⁾ im Rahmen einer quantisierten Theorie hervorgehoben: Der normale Grundzustand des Atoms wird instabil und zerfällt unter Positronenemission. Man spricht vom spontanen Zerfall des neutralen Vakuums in einen neuen, geladenen Vakuumzustand.

Detaillierte Untersuchungen lassen erwarten, daß das Erreichen der überkritischen Region durch Elektronenabschirmung, Nichtlinearitäten in den Feldgleichungen oder durch Effekte der Feldfluktuationen nicht verhindert werden kann. Phänomenologische Ansätze für nichtlineare Effekte im Maxwell- oder Dirac-Feld haben ergeben, daß eine genügend große Abschwächung der Bindungsenergie im überkritischen Bereich nur durch Widersprüche zu den genau vermessenen Spektren schwerer Atome erkaufte werden kann^{18),19)}. Später wurden die quantenelektrodynamischen Korrekturen der Vakuumpolarisation^{20),21)} und (allerdings weniger genau) der Selbstenergie²²⁾ in überschweren Atomen numerisch be-

(§) Fußnote: Wegen der Spin-Entartung werden zwei Positronen erzeugt. Genau genommen geschieht dies infolge der Elektron-Elektron-Wechselwirkung bei zwei leicht unterschiedlichen Werten¹¹⁾ von Z_{cr} .

rechnet, sie sollten bei $Z_{cr}^{(1s)}$ im Bereich von 10 keV, also 1% der Bindungsenergie liegen. Ihre Messung wäre ein sehr ehrgeiziges Ziel der Quantenelektrodynamik starker Felder.

Einen "anschaulichen" Zugang zum Phänomen des überkritischen Zustandes erhält man durch Betrachtung der Wellenfunktion des unteren Kontinuums in Resonanznähe. In Abb. 2 ist ihr Verlauf in Abhängigkeit der Radialkoordinate r schematisch dargestellt. Während die Wellenfunktion im Innenbereich einem normalen $1s$ -Zustand ähnelt, zeigt sie bei größeren Abständen einen oszillierenden Verlauf. Es handelt sich um einen typischen Durchtunnelungsprozess, bei dem ein "Elektronenanteil" und ein "Positronenanteil" der Wellenfunktion durch den klassisch verbotenen "gap" der Diracgleichung zwischen $V - mc^2$ und $V + mc^2$ getrennt sind.

Diese Darstellung läßt auch den Zusammenhang mit dem Klein'schen Paradoxon erkennen. O. Klein bemerkte als erster, daß die Diracgleichung mit einer Potentialschwelle von mehr als $2 mc^2$ zu einem ungewöhnlichen Anstieg der Reflexions- und Durchlasskoeffizienten für Elektronenstreuung führt²³⁾. Dies wurde später im Rahmen der Löchertheorie als Erzeugung von Paaren, im Fall eines Kastenpotentials als spontane Positronenemission bis zur Auffüllung der tief gebundenen Niveaus interpretiert^{24),25)}. Da die Erzeugungsrate exponentiell mit der Tunnelbreite absinkt²⁶⁾ sind nur überkritische atomare Systeme lokalisiert genug, um eine experimentelle Überprüfung des seit über 50 Jahren bekannten Klein'schen "Paradoxons" zu gestatten.

Die Natur stellt keine überschweren Kerne mit $Z > Z_{cr}$ zur experimentellen Untersuchung der Physik starker elektrischer Fel-

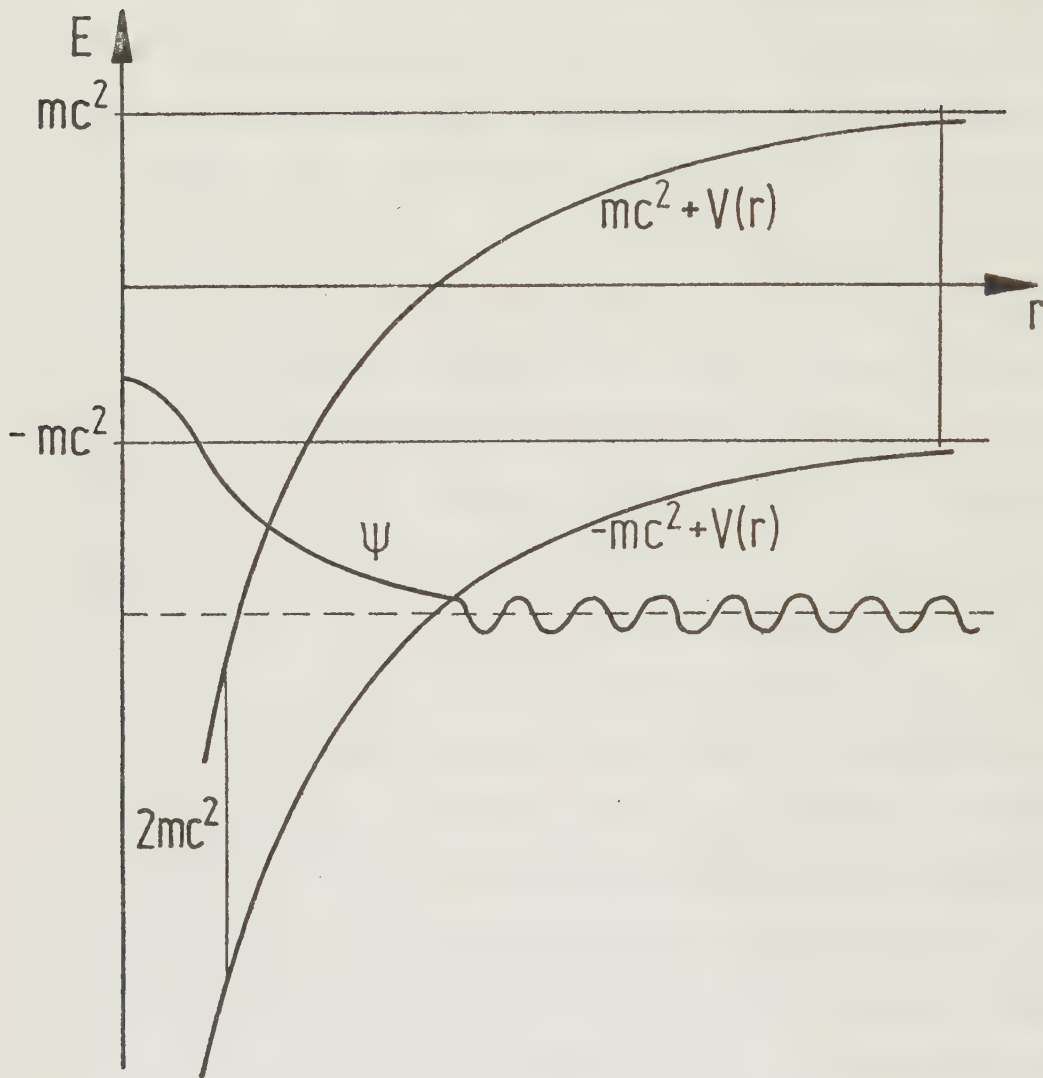


Abb. 2 : Schematisches Bild einer überkritischen 1s-Wellenfunktion. Im Bereich $V - mc^2 < E_{1s} < V + mc^2$ wird die Energielücke zwischen Teilchen- und Antiteilchen-Kontinuum durchtunnelt.

der zur Verfügung. Es ist jedoch möglich, während eines Stoßes zweier Kerne vom oberen Ende des Periodensystems die notwendige Ladung für eine kurze Zeit auf genügend kleinem Bereich zu versammeln^{27),12),15)}. Derartige Experimente sind in letzter Zeit am Schwerionenbeschleuniger UNILAC der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI, Darmstadt) durchführbar geworden. Auf die Möglichkeit und Bedeutung solcher Experimente wurde von W. Greiner und Mitarbeitern während verschiedener GSI-Seminare seit 1969 hingewiesen.

Anstelle der fiktiven Kernladungszahl Z dient nun der zeitabhängige internukleare Abstand $R(t)$ als Parameter, der die Stärke des Potentials bestimmt. Wegen der nichtrelativistischen Bewegung der Kerne kann man in erster Näherung annehmen, daß sich die Elektronen auf deren jeweilige Konfiguration einstellen. Die Änderung der resultierenden quasimolekularen Energiezustände im Verlauf des Stoßes ist in Abb. 3 für einen Uran-Uran-Stoß qualitativ wiedergegeben.

Grundlegend für alle quantitativen Untersuchungen zur spontanen Positronenerzeugung ist die Größe des kritischen Abstands R_{cr} , bei dem $E_{1s}(R_{cr}) = -mc^2$ erreicht wird. Durch numerische Lösung der Zwei-Zentren-Diracgleichung wurde $R_{cr}^{(1s)} \approx 36$ fm für U-U und 48 fm für U-Cf-Stöße gefunden²⁸⁾⁻³¹⁾. In ersten Rechnungen zur spontanen Positronenerzeugung wurde ein statisches Modell angenommen, in dem ein vorhandenes Loch mit variabler spontaner Breite $\Gamma(R(t))$ frei zerfällt^{32),33)}. Diese Beschreibung ist jedoch nicht ausreichend. Da der Stoß schnell verläuft (die Stoßzeit ist mit $\lesssim 10^{-20}$ sec klein im Vergleich zur Zerfallszeit der Resonanz) spielen die Verbreiterung durch die

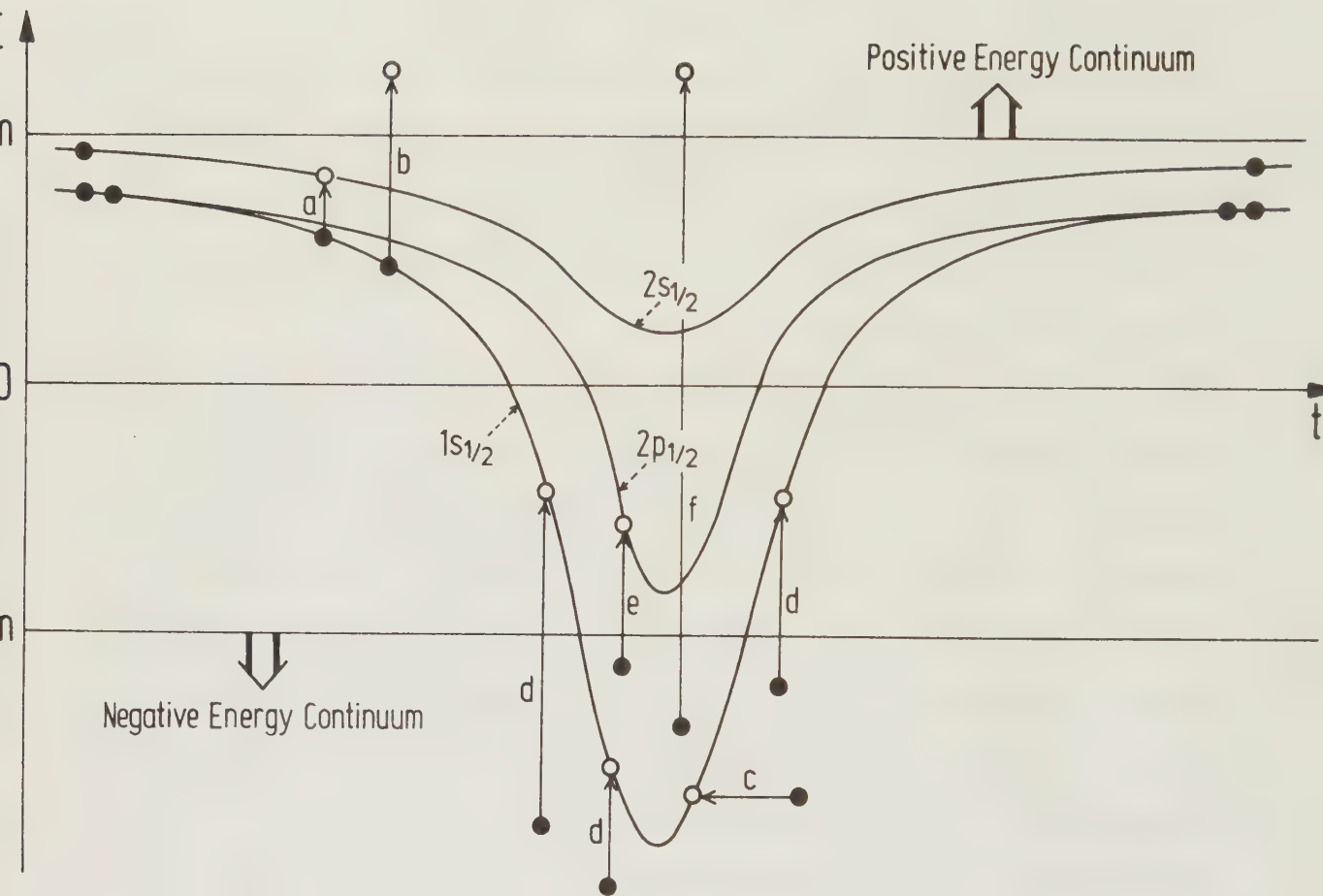


Abb. 3 : Mögliche dynamische Anregungsprozesse zur Erzeugung von Löchern und Positronen im U-U-Stoß. Erläuterung im Text.

Heisenberg'sche Unschärferelation und die Möglichkeit dynamisch induzierter Übergänge eine große Rolle.

Tatsächlich sind unter normalen experimentellen Bedingungen die inneren atomaren Schalen der stoßenden Ionen besetzt (Mehrfachstoßprozesse, bei denen ein früher erzeugtes K-Loch eingebracht wird, sind wegen der kurzen Lebensdauer solcher Löcher in schweren Atomen nicht möglich). Darum ist es ohnehin notwendig, während des gleichen Stoßes ein K-Loch dynamisch anzuregen. Einige der relevanten Übergänge sind in Abb. 3 durch Pfeile markiert. a und b bezeichnen die Möglichkeit, Löcher im 1s-Niveau zu erzeugen, entweder durch Kopplung zu höheren gebundenen Niveaus oder durch direkte Ionisation ins Kontinuum. Das so erzeugte Loch kann durch Kopplung an das untere Kontinuum als Positron freigesetzt werden. Dies kann durch induzierte Übergänge während des ganzen Stoßes erfolgen (d). Im "Eintauchbereich" $R < R_{cr}$ tritt zusätzlich die spontane Positronenerzeugung aufgrund der Zerfallsbreite der Resonanz auf (c). Die Stoßdynamik kann auch Übergänge zu höheren gebundenen Niveaus (e) oder gar ins obere Kontinuum (f), also direkte Paarerzeugung bewirken.

Alle diese Beiträge werden sich als wichtig herausstellen. Der Grund dafür, daß induzierte Übergänge eine besonders große Rolle spielen, liegt am Verhalten der Wellenfunktionen des überschweren quasimolekularen Systems. Wie schon diskutiert, reagieren die Zustände mit $j = 1/2$ im Bereich $Z > 137$ sehr empfindlich auf den Kernradius oder (im molekularen Fall) auf den Zweizentrenabstand R . Bei kleinen R werden die Wellenfunktionen durch das elektrische Feld stark deformiert, die Aufenthaltsdichte der Elektronen im Nahbereich wächst stark an. Die-

ses Verhalten führt zu großen Kopplungen $\dot{R} \langle \varphi_f | \partial / \partial R | \varphi_i \rangle$ durch die von außen aufgezwungene Kernbewegung $R(t)$. Das Elektron-Positron-Feld kann daher der schnellen Änderung der molekularen Zustände nicht vollständig folgen. Entsprechend diesem Bild wurde der direkte Prozess (f) als "Abschütteln der Vakuumpolarisationsladung" interpretiert³⁴⁾. Die betroffenen Wellenfunktionen des oberen und unteren Kontinuums sind genau diejenigen, deren Deformation im Coulombfeld der Kerne im statischen Fall für die Vakuumpolarisation verantwortlich ist.

Diese Art der Paarerzeugung unterscheidet sich also beträchtlich von der üblichen Paarerzeugung in relativistischen Stößen von Elementarteilchen, wo es ausreicht, den Austausch zweier virtueller Photonen störungstheoretisch zu berechnen. In langsamen Stößen überschwerer Systeme hingegen wird das volle kohärente Feld der beiden Kerne wirksam. Rechnungen in Born'scher Näherung (erstmal durchgeführt von Heitler und Nordheim³⁵⁾ sowie von Lifschitz³⁶⁾) reichen nicht aus. Unter anderem liefern sie eine Z-Abhängigkeit proportional Z^4 , während unsere Ergebnisse auf eine wesentlich höhere Potenz (etwa Z^{18}) hindeuten. Auch eine Rechnung in atomarer Basis mit semiklassischer Bahnbewegung der Stoßpartner³⁷⁾, die durch die experimentelle Widerlegung³⁸⁾ des Resultats in Born'scher Näherung angeregt wurde, ist nur für Stöße von Protonen auf leichte Kerne anwendbar.

Das Ziel dieser Arbeit wird sein, die Anregungsprozesse aus Fig. 3 dynamisch und kohärent zu behandeln und damit eine möglichst auch quantitativ gültige Theorie der Paarerzeugung und Lochanregung in Stößen mit $Z = Z_1 + Z_2 \gtrsim 1/\alpha$ und Geschwindig-

keiten bis knapp oberhalb der nuklearen Coulombschwelle ($v/c \approx .1$) zu entwickeln. Es wird sich dabei erweisen, daß es notwendig ist, die Dynamik der Positronen^{39),40)} und der K-Loch-Erzeugung vollständiger und genauer als bisher zu behandeln.

Zu diesem Zweck wird in den folgenden Kapiteln zunächst allgemein der Formalismus zur Beschreibung elektronischer Anregungen im semiklassischen Modell diskutiert (II) und auch auf die Rolle des Pauli-Prinzips für Einzel- und Koinzidenzanregungen eingegangen (III). Anschließend werden Eigenschaften der später benötigten Energien und Matrixelemente sowie die Näherungen bei ihrer Berechnung und die Brauchbarkeit des quasimolekularen Modells untersucht (IV). Kap. V. enthält eine kurze Beschreibung der spontanen Positronenerzeugung in einem schematischen Modell, worauf in Kap. VI. verschiedene Verfahren zur dynamischen Beschreibung dieses Prozesses verglichen werden. Für die weiteren Rechnungen wird schließlich ein Projektionsverfahren zur Behandlung des überkritischen Zustands entwickelt (VII).

Die beiden nächsten Kapitel enthalten numerische Ergebnisse zur K-Loch- und vor allem zur Positronenerzeugung, die in Störungstheorie (VIII) und durch gekoppelte-Kanal-Rechnungen (IX) erhalten wurden. Letztere werden auch mit den Resultaten kürzlich bei der GSI (Darmstadt) durchgeführter Experimente verglichen. Zum Abschluß enthält Kap. X erste Untersuchungen zu einer möglichen Ausdehnung der Experimente auf Stoßenergien über der Coulombbarriere. Hier kann unter Umständen eine direkte Messung der nuklearen Reaktionszeiten aus der Struktur des Delta-Elektronenspektrums möglich werden. Andererseits würden Stöße mit verlängerter Kontaktzeit die Beobachtung der spontanen Positronenerzeugung wesentlich erleichtern.

II) Elektronische Anregungen im semiklassischen Modell

1) Allgemeine Betrachtungen

Die elektronischen Anregungen im Stoß von Ionen oder Atomen werden schon seit langer Zeit experimentell und theoretisch untersucht. Je nach Anwendungsbereich wurden dabei eine Vielzahl von Modellen und Näherungsmethoden entwickelt (für einen Überblick über die Literatur siehe etwa Ref. 41)-46)), die von voll quantenmechanischen bis zu rein klassischen Verfahren reichen. In der vorliegenden Arbeit sollen die Anregungen innerer Schalen und die Erzeugung von Positronen in Stößen sehr schwerer Ionen bei Einschußenergien bis zur nuklearen Coulombschwelle berechnet werden. Unter dieser Bedingung ist die semiklassische Näherung anwendbar, bei der angenommen wird, daß die Bewegung der Kerne rein klassisch beschrieben werden kann. Die Anregungen der Elektronenhülle werden dann unter Annahme einer bestimmten nuklearen Trajektorie quantenmechanisch berechnet.

Ein Kriterium für die klassische Behandlung ist die Größe des Bohr-Sommerfeld-Parameters⁴⁷⁾

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \gg 1 \quad , \quad (1)$$

der als Verhältnis des Minimalabstands zur deBroglie-Wellenlänge der streuenden Teilchen gedeutet werden kann. Die Bedingung (1) ist wegen des quadratischen Anstiegs mit Z für die hier interessierenden sehr schweren Stoßsysteme sehr gut erfüllt ($\eta \geq 500$ für U-U). Weiterhin muß sichergestellt sein, daß die Anregungsenergie klein ist im Vergleich zur kinetischen Energie der Bahnbewegung, da sonst die Rückwirkung auf die Trajektorie

nicht vernachlässigt werden darf

$$\Delta E \ll E_1 . \quad (2)$$

Auch diese Forderung ist im vorliegenden Fall sehr gut erfüllt.

Die semiklassische Näherung läßt sich aus der quantenmechanischen Beschreibung durch Faktorisierung der Gesamtwellenfunktion in nuklearen und elektronischen Anteil ableiten. Für die Kernwellenfunktion kann man ein schmales Wellenpaket ansetzen, das um ein $\vec{R}(t)$ lokalisiert ist, welches näherungsweise der klassischen Bewegungsgleichung folgt. Für die elektronische Wellenfunktion wirken die Kerne dann wie klassische, bei $\vec{R}(t)$ lokalisierte bewegliche Potentialzentren. Alternativ zu dieser Methode kann man für die Kernwellenfunktion eine WKB-Näherung durchführen. Wir werden hier nicht näher auf diese Ableitungen eingehen sondern verweisen auf die Literatur^{44),48),49)}.

Im Rahmen der semiklassischen Näherung ist es üblich, die Elektronenwellenfunktion in ein vollständiges System von Basiszuständen zu entwickeln. Für die Entwicklungskoeffizienten läßt sich dann leicht ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem ableiten (siehe unten). Die Wahl der Basis ist dabei zunächst willkürlich. Im Falle einer schwachen Störung des Targetatoms durch das Projektil ist es ausreichend, atomare Wellenfunktionen zu benutzen und die gekoppelten Differentialgleichungen in Störungstheorie auf einfache Zeitintegrale zu reduzieren. Dieses Modell³⁷⁾ (SCA) wurde ausführlich untersucht, angeregt teilweise durch die Erfolge in der Kernphysik bei der Beschreibung der nuklearen Coulombanregung⁵⁰⁾. In vielen Fällen, insbesondere für stark asymmetrische Stöße ist das Modell erfolgreich^{51),52)}.

Für langsame Stöße nahe der Symmetrie ($Z_1 \approx Z_2$) ist eine andere Beschreibungsweise angebracht. Die Elektronenhülle hat dann ausreichend Zeit, um sich auf das gemeinsame Coulombfeld der Kerne einzustellen. Deshalb wird man bei der Berechnung der Anregungen als Basis die stationären Lösungen des Zwei-Zentren-Problems verwenden. Unter Umständen genügt es, sich in diesem quasimolekularen Modell wieder auf die erste Ordnung Störungstheorie zu beschränken. Voraussetzung dafür ist das adiabatische Verhalten des jeweilig interessierenden Elektronenniveaus. Für eine einfache Abschätzung kann man fordern, daß die Stoßzeit τ_{coll} groß sein soll gegen die charakteristische "Umlaufzeit" τ_{orb} des Elektrons

$$\tau_{\text{coll}} / \tau_{\text{orb}} \gg 1 . \quad (3)$$

In Ref. 53) wurde erstmalig darauf hingewiesen, daß in Stößen überschwerer Systeme (etwa U- U) nahe der Coulombbarriere dieses Kriterium für die K-Schale erfüllt ist. Selbstverständlich verhält sich das System nicht voll adiabatisch, da es dann zu keinen dynamischen Anregungen käme.

Die Idee, adiabatische Zustände zur Beschreibung der Anregung in atomaren Stößen zu verwenden, läßt sich im Zusammenhang mit der Born-Oppenheimer-Näherung weit zurückverfolgen⁵⁴⁾, fand aber zunächst wenig Anwendungen. Später wurde das auch als PSS-Methode (perturbed stationary states) bezeichnete Modell vielfach benutzt, zunächst zur Berechnung von Ladungstransfer⁵⁵⁾ und auch direkter Ionisation^{56), 57)} für das Modell-System p-H. Eine wesentliche Anwendung der quasimolekularen Idee ist das Promotionsmodell von Fano und Lichten⁵⁸⁾: Hiernach können die

Elektronen mit variierendem Kernabstand R entlang der adiabatischen Niveaus energetisch angehoben und in nahe benachbarte Zustände angeregt werden, die zu Beginn des Stoßes leer waren. Auf diese Weise können auch in sehr langsamen Stößen Löcher in inneren Schalen erzeugt werden.

Im folgenden wird das quasimolekulare Modell auf die inneren Schalen sehr schwerer Stoßsysteme angewandt. Hier spielen die relativistischen Effekte mit den schon in der Einleitung erwähnten Konsequenzen eine entscheidende Rolle. Die Berücksichtigung der gemeinsamen Wirkung der beiden stoßenden Kerne in einem molekularen oder quasiautomaren Bild ist daher unumgänglich. Dasselbe Modell wird dann auch auf die Erzeugung von Positronen in unterkritischen und überkritischen Schwerionenstößen ausgedehnt. In allen Rechnungen werden wir die Wechselwirkung zwischen den atomaren Elektronen vernachlässigen. Die Anwesenheit mehrerer Elektronen macht sich dann nur noch durch das Pauli'sche Ausschließungsprinzip bemerkbar. Dies wird in Kap. III mit Hilfe der Methode der zweiten Quantisierung untersucht werden.

2) Die gekoppelten-Kanal-Gleichungen

Es sollen die elektronischen Anregungen im Stoß zweier Atome berechnet werden, deren Kerne sich entlang einer vorgegebenen klassischen Trajektorie $\vec{R}(t)$ bewegen. Beschränkt man sich auf die Betrachtung eines einzelnen Elektrons, dann ist die zeitabhängige Diracgleichung zu lösen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_i(t) = H_{\text{TCD}}(\vec{R}(t)) \phi_i(t) \quad (4)$$

mit dem Zweizentren-Hamiltonoperator

$$H_{\text{TCD}} = c \vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + e V. \quad (5)$$

Zur vollständigen Behandlung des Streuproblems ist (4) mit definierten Randbedingungen zu lösen. Vor dem Stoß ($t \rightarrow -\infty$) soll sich das Elektron in einem Eigenzustand φ_i eines der beiden getrennten Atome befinden. Die Wahrscheinlichkeit, daß nach dem Stoß ($t \rightarrow +\infty$) ein bestimmter Eigenzustand φ_k angeregt ist, ist durch das Quadrat des Überlapps mit ϕ_i gegeben

$$P_k(b) = \left| \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \varphi_k(t) | \phi_i(t, b) \rangle \right|^2. \quad (6)$$

Den totalen Querschnitt zur Erzeugung des Endzustandes φ_k (bei gegebenem Anfangszustand) erhält man durch Integration über alle Stoßparameter

$$\sigma_k = \int d^2b P_k(b) = 2\pi \int_0^\infty db \cdot b P_k(b). \quad (7)$$

Das elektromagnetische Potential $(\vec{A}, V)$ ist beim Lösen von (4)

als vorgegebenes äußeres Feld zu behandeln, dessen Verlauf infolge der Kernbewegung $\vec{R}(t)$ explizit zeitabhängig ist. Es muß der Wellengleichung mit Kernstrom und -ladungsdichte als Quelle genügen. Formal kann man schreiben

$$A_{\mu}(\vec{r}, t) = \int D^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') j_{\mu}(\vec{r}', t') d^3r' dt' \quad (8)$$

mit der retardierten Green'schen Funktion D^R .

Die Gestalt des Viererpotentials A_{μ} ist natürlich von der Wahl der Eichung abhängig. Es ist naheliegend, die Coulomb-Eichung zu wählen, in der das Potential (für zwei Punktkerne) die Form ($e = -|e|$)

$$V(\vec{r}, t) = - \frac{Z_1 e}{|\vec{r} - \vec{R}_1(t)|} - \frac{Z_2 e}{|\vec{r} - \vec{R}_2(t)|} \quad (9)$$

annimmt. Dabei ist auf der rechten Seite $\vec{R}(t) = \vec{R}_2(t) - \vec{R}_1(t)$ instantan zur selben Zeit t zu verwenden. Dies hat den Vorteil, daß der Hamiltonoperator (außer durch das Vektorpotential $\vec{A}$) nur noch vom Zweizentrenabstand abhängt. Die durch das Vektorpotential beschriebenen magnetischen und Retardierungseffekte werden in den folgenden Rechnungen vernachlässigt. Sie sind im wesentlichen um einen Faktor $v/c < .1$ schwächer als das Coulombpotential und spielen nur zur Erzeugung von Spin-Polarisation eine Rolle⁵⁹⁾. Im Anhang A wird das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}, t)$ näher untersucht und in Multipole zerlegt.

Eine direkte numerische Integration des zeitabhängigen Zweizentren-Problems (4) ist schwierig und für die Diracgleichung wohl noch nicht versucht worden. Vielmehr ist es üblich, die Wellenfunktion ϕ_i in einen vollständigen Satz von Basis-

zuständen zu entwickeln

$$\phi_i(t) = \sum_k a_{ik}(t) \varphi_k(t) e^{-i\chi_k(t)} . \quad (10)$$

(Hier wie überall im folgenden schließt die Summe ein Integral über den kontinuierlichen Teil des Spektrums ein). Um die Zeitabhängigkeit der Entwicklungsamplituden $a_{ij}(t)$ zu vereinfachen wurde ein Phasenfaktor

$$\chi_j(t) = \int_{t_0}^t dt \langle \varphi_j | H | \varphi_j \rangle \quad (11)$$

abgespalten. Wie aus der Ableitung der zeitabhängigen Störungstheorie bekannt, kann man durch Projektion auf die Basiszustände ein gekoppeltes System von zeitabhängigen Differentialgleichungen erster Ordnung gewinnen. Wenn die Basis der φ_j orthonormal ist lautet das System

$$\dot{a}_{ij} = - \sum_{k \neq j} a_{ik} \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial t} + i H | \varphi_k \rangle e^{-i(\chi_k - \chi_j)} \quad (12)$$

Im allgemeinen können also zwei Arten von Kopplungstermen auftreten: Anregungen aufgrund der möglichen Zeitabhängigkeit der Basisfunktionen φ_k und "Potentialkopplungen" durch nichtdiagonale Matrixelemente des Hamiltonoperators, wenn die φ_k keine Eigenzustände von H sind. Der Diagonalterm der Kopplungsmatrix wurde durch die Phasenwahl (11) eliminiert.

Wenn ein nichtorthogonaler Basissatz verwendet werden soll wird (12) abgeändert

$$\sum_k \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle e^{-i(\chi_k - \chi_j)} \dot{a}_{ik} = - \sum_k a_{ik}(t) (e^{-i(\chi_k - \chi_j)} \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial t} + i H | \varphi_k \rangle - i \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | H | \varphi_k \rangle) \quad (13)$$

Um ein explizites Differentialgleichungssystem zu erhalten muß (13) also noch mit der Inversen der Überlappmatrix $\langle \varphi_j | \varphi_k \rangle$ multipliziert werden.

Drei extreme Fälle sind bei der Wahl der Basis φ_k möglich.

- (1) Man kann zeitunabhängige atomare Wellenfunktionen des Targetatoms verwenden, wobei das vorbeifliegende Projektil als Störpotential wirkt. Für langsame, adiabatische Stöße wird diese Basis schlecht, da der Effekt der verstärkten Bindung und der Deformation der Orbitale nur durch komplizierte Überlagerung atomarer Zustände beschrieben werden kann. Allenfalls ist man in der Lage, durch genäherte oder semiempirische Verfahren Bindungsenergie- und "Polarisations-" Korrekturen zu berücksichtigen.
- (2) Für Anregungen, die hauptsächlich bei kleinen Kernabständen erfolgen, wurden von Briggs⁶⁰⁾ als alternative Basis die ebenfalls zeitunabhängigen Zustände des vereinigten atomaren Systems vorgeschlagen. Die Differenz der Kern-Coulombpotentiale zum sphärisch symmetrischen Grenzfall kann als Störung entwickelt werden.
- (3) Von allgemeiner Gültigkeit in adiabatischen Stößen ist das quasimolekulare Modell, bei dem die φ_i stationäre Eigenfunktionen des Zweizentren-Hamiltonoperators zu festgehaltenem Kernabstand $\vec{R}$ sind

$$H_{\text{TCD}}(\vec{R}) \varphi_j = E_j(R) \varphi_j . \quad (14)$$

Bei dieser Wahl verschwindet die nichtdiagonale Potentialkopplung und die Anregungen werden durch den Operator $\partial/\partial t$ vermittelt, der über die parametrische Zeitabhängigkeit durch $\vec{R}(t)$

auf die Wellenfunktionen wirkt. Anregungen rühren also daher, daß das Teilchen der zeitlichen Änderung der adiabatischen Zustände "nicht folgen kann". Die Ableitung $\partial/\partial t$ läßt sich durch die Änderung des internuklearen Abstands ausdrücken. Dabei muß man allerdings auf das benutzte Koordinatensystem achten. Die Ableitung muß bei festgehaltener Elektronenkoordinate im Schwerpunktssystem berechnet werden. Während die zeitabhängige Diracgleichung (4) nur in Inertialsystemen gilt (z. B. im Schwerpunktssystem der stoßenden Atome) wählt man für die molekularen Basiszustände (14) zweckmäßigerweise häufig die Symmetrieachse als Quantisierungsachse. Daher muß eine Transformation vom intrinsischen, mitrotierenden System $(x' y' z')$ ins Inertialsystem $(x y z)$ vorgenommen werden. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, daß die Kernbewegung in der $x' z'$ - (oder $x z$ -) Ebene erfolgt, mit der z' -Achse als internuklearer Verbindungslinie.

Das intrinsische System rotiere mit dem zeitabhängigen Drehwinkel $\Theta(t)$ um die $y = y'$ -Achse. Dann ist

$$\varphi_i(\vec{r}', \vec{R}(t)) = e^{-i\Theta j_y} \varphi_i(\vec{r}, R(t))$$

mit dem Drehimpulsoperator j_y des Elektrons. Die Differentiation nach t (bei festgehaltener Elektronenkoordinate $\vec{r}$) liefert

$$\frac{\partial}{\partial t} \Big|_{\vec{r}} \varphi_i(\vec{r}', \vec{R}) = e^{-i\Theta j_y} (-i\dot{\Theta} j_y + \frac{\partial}{\partial t} \Big|_{\vec{r}}) \varphi_i(\vec{r}, R)$$

$$\text{oder kurz} \quad \frac{\partial}{\partial t} = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - i \vec{\omega} \cdot \vec{j} \quad . \quad (15)$$

Man erhält also zwei verschiedene Beiträge: Eine radiale Kopplung aufgrund der Zeitabhängigkeit des Kernabstands und eine Rotationskopplung wegen des nichtinertialen Charakters des benutzten rotierenden Koordinatensystems. Für die in dieser Arbeit betrachteten Prozesse wird sich herausstellen, daß die radiale Kopplung dominiert. In der benutzten Näherung für die Wellenfunktionen (siehe IV.1) verschwindet der Einfluß der Corioliskopplung sogar vollständig, wenn man sich nicht für die Spin-Orientierung interessiert.

Zum Abschluß dieser allgemeinen Betrachtungen zur Berechnung atomarer Anregungen müssen wir noch auf die Asymptotik der dynamischen Wellenfunktionen $\varphi_i(t)$ eingehen. Projiziert man sie auf atomare Zustände, so erhält man die Wahrscheinlichkeitsamplituden der Anregung. Für diese sollten sich asymptotisch ($R \rightarrow \infty$) feste Werte einstellen. Verwendet man jedoch als Basis die molekularen Lösungen, Gl.(14), dann ist dies nicht der Fall, vielmehr oszillieren die Entwicklungskoeffizienten ungedämpft. Da manche der Kopplungsmatrixelemente in (12) nicht gegen Null gehen, ist eine direkte Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen nicht ausreichend.

Dies wurde zuerst von Bates und McCarroll aufgeklärt⁶¹⁾⁻⁶³⁾. Nicht die zu festgehaltenem Zweizentrenabstand $\vec{R}$ berechneten Basisfunktionen, sondern mit den Coulombzentren mitbewegte Zustände ("travelling orbitals") erfüllen asymptotisch die zeitabhängige Schrödingergleichung (im nichtrelativistischen Fall). Sie gehen aus den stationären Lösungen durch eine Galilei-Transformation hervor. Sei $\vec{v}$ die asymptotische Relativgeschwindigkeit der stoßenden Kerne und φ_i die Wellenfunktion im

Schwerpunktssystem. Dann lautet die mitbewegte Wellenfunktion ($R \rightarrow \infty$):

$$\tilde{\varphi}_i(\vec{r}, \vec{R}) = e^{i \frac{m}{\hbar} \left[\pm \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{r} - \frac{1}{8} v^2 t \right]} \varphi_i(\vec{r}, \vec{R}).$$

Das Vorzeichen im Exponenten hängt davon ab, zu welchem der beiden Kerne der Zustand asymptotisch korreliert (im symmetrischen Fall $Z_1 = Z_2$ müssen Linearkombinationen gebildet werden). Die beiden Terme im Translationsfaktor lassen sich als Impuls und Translationsenergie der Elektronen-Mitbewegung interpretieren. Man kann zeigen, daß durch diese Korrektur die spuriosen langreichweitigen Kopplungen zu Null gebracht werden.⁶¹⁾

Während die Asymptotik dadurch eindeutig bestimmt ist, bietet die Behandlung des Translationseffekts während des Stoßes noch Schwierigkeiten, insbesondere bei Verwendung der quasimolekularen Basis. Da das Elektron im Stoß nicht fest einem einzelnen Zentrum zugeordnet ist, wurde eine Einschaltfunktion ("switching function")^{64), 65)} eingeführt, von der nur die Grenzbedingungen

$$\lim_{R \rightarrow \infty} f(\vec{r}, \vec{R}) = \pm 1 \quad \text{für} \quad |\vec{r} - \vec{R}_{1,2}| \text{ endlich,}$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} f(\vec{r}, \vec{R}) = 0 \quad \text{für} \quad R \text{ endlich}$$

gefordert werden. Durch die Transformation

$$\tilde{\varphi}_i(\vec{r}, \vec{R}) = e^{i \frac{m}{\hbar} \vec{v} \cdot \frac{1}{2} \vec{r}} f_i(\vec{r}, \vec{R}) \cdot \left[\vec{r} - \frac{1}{4} f_i(\vec{r}, \vec{R}) \vec{R} \right] \varphi_i(\vec{r}, \vec{R})$$

wird dann ein glattes Einsetzen des Translationseffekts erreicht.

Durch Optimierung der Funktion $f(\vec{r}, \vec{R})$ erreichten Thorson

und Mitarbeiter^{65),66)} im $p - H$ -System eine drastische Reduktion der radialen Kopplungsmatrixelemente. In den uns besonders interessierenden sehr schweren Stoßsystemen hat die Kopplung ein ausgeprägtes Maximum bei $R \longrightarrow 0$. Die asymptotische Mitbewegung sollte daher keine so große Rolle spielen. In den numerischen Rechnungen wurde der Effekt nur summarisch durch Abschneiden der Kopplungen bei großen Abständen R berücksichtigt. Für eine Übertragung des Konzepts der Translationsfaktoren auf die Diracgleichung und eine ausführliche Diskussion der Problematik verweisen wir auf die Arbeit von Heinz⁴⁹⁾.

3) Die Einteilchenamplituden

Im folgenden sollen einige Eigenschaften der Zeitentwicklungsamplituden a_{ij} abgeleitet werden, die unabhängig vom verwendeten Modell gelten. Sie sind von praktischem Wert bei der Lösung der gekoppelten-Kanal-Gleichungen und haben teilweise auch prinzipielle Bedeutung für die weitere theoretische Entwicklung im nächsten Kapitel. Wir beschränken uns zunächst auf orthogonale Basiszustände und benutzen für die Kopplungsmatrix aus (II.12) die Abkürzung

$$M_{jk} := \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial t} + iH | \varphi_k \rangle. \quad (16)$$

Diese Matrix ist antihermitesch, also

$$M_{jk} = - M_{jk}^+ = - M_{kj}^*. \quad (17)$$

$$(i) \quad \sum_k a_{jk}^*(t) a_{ik}(t) = \delta_{ij} \quad (18)$$

Diese Gleichung sichert die Zeitunabhängigkeit von Normierung und Orthogonalität der Lösungen der gekoppelten Differentialgleichungen. Die zeitliche Konstanz der Summe läßt sich durch Differentiation nach t und Einsetzen der Differentialgleichung (II.12) zeigen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \sum_k a_{jk}^*(t) a_{ik}(t) &= - \sum_k \sum_l a_{jl}^* M_{kl}^* e^{i\chi_{lk}} a_{ik} - \\ &- \sum_k \sum_l a_{jk}^* a_{il} M_{kl} e^{-i\chi_{lk}} = - \sum_{k,l} a_{jl}^* a_{ik} e^{i\chi_{lk}} (M_{kl}^* + M_{lk}) = 0. \end{aligned}$$

Den konstanten Wert (18) der Summe erhält man aus der Anfangsbedingung $a_{ij}(-\infty) = \delta_{ij}$.

Das Resultat (18) kann auch auf die Unitarität des Zeitentwicklungsoperators $U(t, t_0)$ zurückgeführt werden. Für die zeitabhängigen Wellenfunktionen $\phi_i(t)$ gilt

$$\begin{aligned} \langle \phi_j(t) | \phi_i(t) \rangle &= \langle \phi_j(-\infty) | U^\dagger(t, -\infty) U(t, -\infty) | \phi_i(-\infty) \rangle \\ &= \langle \phi_j(-\infty) | \phi_i(-\infty) \rangle = \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (19)$$

$$(ii) \quad \sum_k a_{kj}^*(t) a_{ki}(t) = \delta_{ij} \quad (20)$$

Mit der Abkürzung $S_{ji}(t)$ für die Summe erhält man durch Differentiation

$$\frac{d}{dt} S_{ji} = \sum_l S_{li} M_{jl}^* e^{i\chi_{lj}} + \sum_l S_{jl} M_{il} e^{-i\chi_{li}}.$$

Das ist ein homogenes, lineares Differentialgleichungssystem für die S_{ji} . Die Anfangsbedingung ist $S_{ji}(-\infty) = \delta_{ij}$. Durch Einsetzen erkennt man wegen der Eigenschaft (17) der Kopplungsmatrix, daß die konstanten Funktionen $S_{ji}(t) = \delta_{ij}$ konsistente Lösungen sind.

Besonders wichtig ist die Tatsache, daß die Gleichungen (18) und (20) allein mit Hilfe der gekoppelten Differentialgleichungen bewiesen wurden. Die gelten daher auch für einen endlichen, beschnittenen Basissatz. Die numerisch berechneten Amplituden a_{ij} müssen daher trotz der fehlenden Vollständigkeit die Bedingungen (18) und (20) exakt erfüllen.

$$(iii) \quad |a_{ij}(\infty)| = |a_{ji}(\infty)| \quad (21)$$

Diese Gleichung⁶⁷⁾ gilt - im Gegensatz zu den Resultaten unter (i) und (ii) - nicht für alle Zeiten sondern nur im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ (§). Gl. (21) drückt das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts aus, wonach Übergänge zwischen zwei Zuständen (hier $i \longleftrightarrow j$) in beiden Reaktionsrichtungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit ablaufen.

(21) gilt daher nur, wenn der Hamiltonoperator $H(\vec{R}(t))$ zeitumkehrinvariant ist. Dies hat zur Voraussetzung, daß die extern vorgegebene Trajektorie $\vec{R}(t)$ symmetrisch verläuft, also

$$R(t) = R(-t) \quad \text{und} \quad \vec{\omega}(t) = \vec{\omega}(-t), \quad (22)$$

wenn $t = 0$ als Umkehrpunkt der Bahn gewählt wird. Der Hamiltonoperator ist dann invariant unter Zeitumkehr und gleichzeitiger Spiegelung der Elektronenkoordinate an der Symmetrieebene, die die Bahn am Umkehrpunkt senkrecht schneidet. In Ref. 67), 68) wird die Wirkung dieser Symmetrieoperation näher untersucht und gezeigt, daß für das Kopplungsmatrixelement gilt

$$M_{ij}(t) = -\epsilon_i \epsilon_j M_{ij}^*(-t). \quad (23)$$

Die Zahlen ϵ_i können den Wert ± 1 annehmen, abhängig von magnetischer Quantenzahl und Parität des Zustands i . Durch Zeitumkehr $t \rightarrow -t$ und Komplexkonjugation in den ursprünglichen gekoppelten Differentialgleichungen (12) läßt sich mittels

(§) Fußnote: Genauer gesagt gilt sie für $t = +t_0$, wenn bei $t = -t_0$ mit der Anfangsbedingung $a_{ij}(-t_0) = \delta_{ij}$ zu integrieren begonnen wurde.

der Symmetrie (23) ableiten:

$$-\frac{d}{dt} a_{ij}^*(-t) = + \sum_k a_{ik}^*(-t) \epsilon_j \epsilon_k M_{jk}(t) e^{i\chi_{kj}(-t)}.$$

Wenn die Phase symmetrisch gewählt wurde, d. h. $\chi_{kj}(-t) = -\chi_{jk}(t)$ dann läßt sich schreiben

$$\frac{d}{dt} \epsilon_j a_{ij}^*(-t) = - \sum_k \epsilon_k a_{ik}^*(-t) M_{jk}(t) e^{-i\chi_{kj}(t)}. \quad (24)$$

Die Amplituden $\epsilon_j a_{ij}^*(-t)$ erfüllen also dasselbe Differentialgleichungssystem wie die ursprünglichen $a_{ij}(+t)$, nur die Randbedingung bei $t \rightarrow -\infty$ ist verändert. Die Voraussetzung aus dem Beweis von Gl. (18) ist daher erfüllt, sodaß gilt

$$\sum_k \epsilon_k a_{jk}(-t) a_{ik}(t) = \text{const.}$$

Benutzt man schließlich die Anfangsbedingung $a_{ik}(-\infty) = \delta_{ik}$ und setzt für t die beiden Grenzwerte $\pm \infty$ ein, so folgt

$$\epsilon_i a_{ji}(\infty) = \epsilon_j a_{ij}(\infty) \quad (25)$$

und damit die Behauptung (21).

In numerischen Rechnungen kann es günstiger sein, die Phase $\chi_k(t)$ nicht symmetrisch zum Umkehrpunkt zu wählen, sondern auf den Zeitpunkt $-t_0$ zu beziehen, bei dem mit der Integration begonnen wird: $\chi'_k(t) = \int_{-t_0}^t dt' E_k(t')$. Behält man die Anfangsbedingung bei, so führt dies zu der Phasenänderung in den Amplituden

$$a'_{ij}(t) = a_{ij}(t) e^{i \int_{-t_0}^t (E_j - E_i) dt'} \quad (26)$$

was natürlich (21) unverändert läßt.

(iv) Im Falle einer nichtorthogonalen Basis sind die modifizierten Differentialgleichungen (13) zu erfüllen. Die Koppelungsmatrix ist nicht mehr antihermitesch, wenn die Überlappmatrix $N_{jk} := \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle$ zeitabhängig wird. Vielmehr gilt

$$M_{jk} + M_{jk}^+ = \frac{d}{dt} N_{jk}(t) . \quad (27)$$

Auch die übrigen Gleichungen dieses Abschnitts werden modifiziert. Insbesondere lautet die Orthonormierungsgleichung nun

$$\sum_{k,l} a_{jl}^* a_{ik} N_{lk} e^{-i\chi_{kl}} = \text{const} , \quad (28)$$

wobei der Wert der Konstanten wieder δ_{ji} sein wird, wenn die Basis asymptotisch orthogonal ist, also $N_{lk}(-\infty) = \delta_{lk}$. Unter dieser Bedingung gilt auch (25) unverändert.

III) Anregungen des Vielteilchensystems

1) Teilchen- und Lochanregung im Formalismus der zweiten Quantisierung

Im letzten Kapitel wurde der Formalismus zur Berechnung der Anregung eines Elektrons im zeitabhängigen elektromagnetischen Feld zweier stoßender Kerne entwickelt. Nun soll die Beschreibung so erweitert werden, daß sie auf Mehrelektronensysteme anwendbar wird. Dies ist wichtig, da in Schwerionenstößen im allgemeinen die Projektilteilchen nur unvollständig ionisiert und die Elektronenhüllen der Targetatome aufgefüllt sind. Wir werden allerdings weiterhin die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigen und auch keine Effekte berücksichtigen, die sich aus der Quantisierung des elektromagnetischen Felds ergeben.

Unter diesen Umständen liegt die Bedeutung der Vielteilchenformulierung hauptsächlich darin, daß sie die Erfüllung des Pauli'schen Ausschließungsprinzips gewährleistet. Außerdem wird dadurch erst eine korrekte Behandlung der Elektron-Positron-Paarerzeugung ermöglicht.

Zur Lösung des Problems bietet sich die feldtheoretische Beschreibung im Formalismus der zweiten Quantisierung an. Es soll das Heisenbergbild verwendet werden: Das System wird durch einen zeitunabhängigen Zustandsvektor $|F\rangle$ beschrieben, der durch die Präparation des Systems bestimmt ist. Die volle Zeitentwicklung ist im Feldoperator $\hat{\psi}(\vec{x}, t)$ enthalten. Für diesen setzen wir eine Fockraum-Zerlegung nach einem vollständigen Satz von klassischen Wellenfunktionen ϕ_q an:

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) = \sum_q \hat{b}_q(t) \phi_q(\vec{x}, t) \quad \text{und} \quad \hat{\psi}^+(\vec{x}, t) = \sum_q \hat{b}_q^+(t) \phi_q^+(\vec{x}, t). \quad (1)$$

Die $\hat{b}_q$ und $\hat{b}_q^+$ sind Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für Feldquanten der Sorte ϕ_q , über deren physikalische Natur noch keine Aussage gemacht wird.

Nach den Quantisierungsregeln für Spin-1/2-Teilchen muß der Feldoperator die Antikommutationsrelationen bei gleicher Zeit

$$\{\hat{\psi}^+(\vec{x}', t), \hat{\psi}(\vec{x}, t)\} = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2)$$

$$\{\hat{\psi}(\vec{x}', t), \hat{\psi}(\vec{x}, t)\} = \{\hat{\psi}^+(\vec{x}', t), \hat{\psi}^+(\vec{x}, t)\} = 0 \quad (3)$$

erfüllen. Dies führt unter Ausnutzung der Vollständigkeitsrelation für die Basiszustände ϕ_q auf die Beziehungen

$$\{\hat{b}_{q'}^+, \hat{b}_q\} = \delta_{q', q}, \quad (4)$$

$$\{\hat{b}_{q'}, \hat{b}_q\} = \{\hat{b}_{q'}^+, \hat{b}_q^+\} = 0. \quad (5)$$

Die Zeitabhängigkeit des Feldoperators wird durch die Feldgleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi} = H(\vec{x}, t) \hat{\psi} \quad (6)$$

bestimmt, wenn $H(\vec{x}, t)$ der explizit zeitabhängige Zweizentren-Hamiltonoperator ist. Die Zeitentwicklung der Teilchenoperatoren folgt aus dem Differentialgleichungssystem

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{b}_q = \sum_{q'} \hat{b}_{q'} \langle \phi_q | H - i \partial / \partial t | \phi_{q'} \rangle \quad (7)$$

Wir bemerken nun, daß die Teilchenoperatoren zeitunabhängig

worden, wenn wir als Basis die Lösungen der gekoppelten-Kanal-Gleichungen (II.12) verwenden. Dies ist zulässig, da der Satz $\phi_q(t)$ zu allen Zeiten t vollständig und auch orthonormiert (vgl. II.19) ist.

Um das System vollständig zu charakterisieren muß der Zustandsvektor $|F\rangle$ festgelegt werden. Wir definieren einen Satz von Niveaus q die vor dem Stoß mit Elektronen besetzt waren und bezeichnen sie durch $q < F$. Zu dieser Menge gehört neben einer endlichen Zahl von gebundenen Zuständen auch das gesamte untere Kontinuum der Diracgleichung. Entsprechend schreiben wir für die Menge der anfänglich leeren Zustände $q > F$. F gibt also die Lage der Fermikante an.

Die Wirkung der Teilchenoperatoren $\hat{b}_q, \hat{b}_q^+$ auf $|F\rangle$ ist dann

$$\begin{aligned} \hat{b}_q |F\rangle &= 0 & q > F, \\ \hat{b}_q^+ |F\rangle &= 0 & q < F. \end{aligned} \quad \text{für} \quad (8)$$

Zur Vereinheitlichung der Schreibweise kann man an dieser Stelle Lochoperatoren $\hat{d}_q$ durch die kanonische Transformation

$$\begin{aligned} \hat{d}_q &= \hat{b}_q^+ \\ \hat{d}_q^+ &= \hat{b}_q \end{aligned} \quad \text{für} \quad q < F \quad (9)$$

eingeführen. Der Feldoperator lautet dann

$$\hat{\psi} = \sum_{q < F} \hat{d}_q^+ \phi_q + \sum_{q > F} \hat{b}_q \phi_q \quad (10)$$

Sowohl $\hat{d}_q$ als auch $\hat{b}_q$ vernichten jetzt den Zustands-

vektor $|F\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{d}_q |F\rangle &= 0 & q < F, \\ \hat{b}_q |F\rangle &= 0 & q > F. \end{aligned} \quad \text{für} \quad (11)$$

Diese Beziehungen, die zunächst nur asymptotisch ($t \rightarrow \infty$) eingeführt werden können, gelten für unsere spezielle Basiswahl zu allen Zeiten t .

Die " ϕ_q -Teilchen" und " ϕ_q -Löcher" können nicht unmittelbar mit beobachtbaren Anregungen identifiziert werden. Da die zugehörige Basis bereits die volle Dynamik enthält gibt es hier scheinbar keine Anregungen. Der Erwartungswert des Anzahloperators ist konstant, nämlich identisch Null:

$$\langle F | \hat{d}_q^\dagger \hat{d}_q | F \rangle = 0 \text{ für } q < F, \quad \langle F | \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_q | F \rangle = 0 \text{ für } q > F. \quad (12)$$

Um auf beobachtbare Erzeugungsraten zu kommen muß der Feldoperator in Eigenzustände des Detektors zerlegt werden (siehe auch Ref. 69). Hierfür könnte man zunächst die adiabatischen Wellenfunktionen $\varphi_q(\vec{x}, t)$, die Gl. (II.14) erfüllen, verwenden. Die dazu gehörigen Teilchen- und Lochoperatoren sollen mit $\hat{b}_q$, $\hat{b}_q^\dagger$, $\hat{d}_q$, $\hat{d}_q^\dagger$ bezeichnet werden:

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) = \sum_{q < F} \hat{d}_q^\dagger(t) \varphi_q(\vec{x}, t) e^{-i\chi_q} + \sum_{q > F} \hat{b}_q(t) \varphi_q(\vec{x}, t) e^{-i\chi_q}. \quad (13)$$

Die Erwartungswerte der zugehörigen zeitabhängigen Anzahloperatoren werden wir mit der Zahl von erzeugten "adiabatischen" Teilchen oder Löchern identifizieren. Zu diesem Zweck muß die Wirkung der neuen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf den Heisenbergzustand $|F\rangle$ bestimmt werden. Durch Identifizie-

ren der beiden Entwicklungen (10) und (13) erhält man

$$\begin{aligned}\hat{d}_q^+(t) &= \sum_{r < F} \hat{d}_r^+ a_{rq}(t) + \sum_{s > F} \hat{b}_s a_{sq}(t) & q < F, \\ \hat{b}_q(t) &= \sum_{r < F} \hat{d}_r^+ a_{rq}(t) + \sum_{s > F} \hat{b}_s a_{sq}(t) & \text{für } q > F.\end{aligned}\quad (14)$$

Wie man aus den Eigenschaften (II.20) der Amplituden ersieht, ist (14) eine kanonische Transformation, die die Antikommunikationsbeziehungen unverändert läßt.

Wir erhalten nun mit (14), (11), (4), (5) die Zahl der Teilchen im Zustand $p > F$

$$N_p(t) = \langle F | \hat{b}_p^+ \hat{b}_p | F \rangle = \sum_{r < F} |a_{rp}|^2 \quad (15)$$

und die Zahl der Löcher im Zustand $q < F$

$$\bar{N}_q(t) = \langle F | \hat{d}_q^+ \hat{d}_q | F \rangle = \sum_{s > F} |a_{sq}|^2. \quad (16)$$

Um die Anregung in einem bestimmten Niveau zu berechnen, genügt es also, die Einteilchen-Übergangswahrscheinlichkeiten aus allen anfänglich besetzten (bei Teilchenerzeugung) oder aus allen anfänglich leeren (bei Locherzeugung) Zuständen inkohärent zu summieren. Das Pauliprinzip macht sich nur in der Beschränkung des Summationsbereichs bemerkbar. Die Ursache für dieses einfache Resultat liegt in der Orthogonalität der Zustände $\phi_q(t)$ die verhindert, daß Elektronen aus verschiedenen Anfangszuständen zu irgend einem Zeitpunkt t einen endlichen Überlapp haben und sich stören können. Erst wenn man Korrelationen betrachtet (siehe den nächsten Abschnitt) treten Kohärenzterme auf.

Bei der Interpretation der Zeitabhängigkeit der $N_p(t)$ ist Vorsicht geboten, da der Teilchenbegriff nur unter der Bedingung der physikalischen Meßbarkeit eindeutig definierbar ist. Da jedoch beim Schwerionenstoß die Atome bei großen Abständen R entkoppeln, kann hier zumindest die asymptotische Teilchenzahl $N_p(+\infty)$ klar festgelegt werden, da die Wellenfunktion in stationäre Zustände zerlegt werden kann.

Bei der Ableitung von (15), (16) wurde die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ausdrücklich vernachlässigt. Näherungsweise läßt sie sich durch Einführung eines mittleren (Einteilchen-) Potentials in den Hamiltonoperator berücksichtigen, der Formalismus wird dadurch nicht verändert. Will man darüber hinausgehen, so ist die Wechselwirkung mit dem vom Elektron-Positron-Feld erzeugten Potential als Quellterm in die Feldgleichung (6) zu schreiben. Sie lautet dann

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi} = H(\vec{x}, t) \hat{\psi} + \gamma^0 \frac{e}{2} \{ \gamma_\mu \hat{\psi}, \hat{A}_e^\mu \} \quad (17)$$

mit dem retardierten elektromagnetischen Potential

$$\hat{A}_e^\mu(\vec{x}, t) = \int d^4y D^R(x - y) \hat{j}_e^\mu(y) . \quad (18)$$

Der Operator der Elektronen-Stromdichte ist

$$\hat{j}_e^\mu = - \frac{e}{2} [\hat{\bar{\psi}}, \gamma^\mu \hat{\psi}] , \quad (19)$$

wobei die Kommutatoren in (17), (19) zur Erhaltung der Ladungssymmetrie der Theorie eingeführt wurden^{16), 70)}.

Die Differentialgleichungen für Teilchenoperatoren im Fock-raum in Analogie zu Gl.(7) wurde von Kirsch angegeben.⁷¹⁾ Der

Wechselwirkungsterm führt zu einer komplizierten Nichtlinearität, die nicht exakt behandelt werden kann. Im allgemeinen werden jedenfalls die $\hat{b}_q(t)$ zeitabhängig.

2) Korrelationen in der Teilchen- und Lochanregung

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, daß die Zahl der erzeugten Teilchen N_p oder Löcher $\bar{N}_q$ durch inkohärente Summation von Übergangswahrscheinlichkeiten in die offenen Kanäle gegeben ist. Dieses einfache Resultat enthält aber auch nur Information zur Besetzung des jeweilig betrachteten Zustands, über alle möglichen Konfigurationen der Elektronen in den anderen Niveaus wird dabei summiert. Soll mehr Information über den Vielteilchenzustand extrahiert werden, dann treten Interferenzterme auf, die Produkte verschiedener Übergangsamplituden in Zwischenzustände enthalten. Die Reduktion auf Einteilchenamplituden ist unter den gemachten Voraussetzungen aber weiterhin möglich.

Von besonderem Interesse ist die korrelierte Erzeugung von zwei Teilchen und/oder Löchern. Zur Berechnung der Zahl der Paare in den Zuständen p und q ist der Erwartungswert $\langle F | \hat{n}_p \hat{n}_q | F \rangle$ des Produkts der Anzahloperatoren zu bilden. Betrachten wir zunächst Teilchen(p)- Loch(q)- Paare, wobei sowohl Anregung innerer Schalen als auch Elektron-Positron-Paarerzeugung eingeschlossen ist:

$$N_{p,q} = \langle F | \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \hat{d}_q^+ \hat{d}_q | F \rangle \quad (20)$$

Durch Anwendung von (14) und den Kommutationsbeziehungen ergibt das

$$\begin{aligned} N_{p,q} &= \sum_{\substack{r < F \\ s > F}} (|a_{rp}|^2 |a_{sq}|^2 - a_{rp}^* a_{rq} a_{sq}^* a_{sp}) \\ &= N_p \cdot \bar{N}_q + \left| \sum_{r < F} a_{rp} a_{rq} \right|^2 . \end{aligned} \quad (21)$$

Dabei wurde in der zweiten Zeile die Summation über s mit Hilfe der Beziehung (II.20) ausgeführt.

Die Zahl korrelierter Paare von Teilchen ist entsprechend

$$\begin{aligned} N_{p,p'} &= \langle F | \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \hat{b}_{p'}^+ \hat{b}_{p'} | F \rangle \\ &= N_p \cdot N_{p'} - \left| \sum_{r < F} a_{rp}^* a_{rp'} \right|^2 . \end{aligned} \quad (22)$$

Für Paare von Löchern gilt schließlich

$$\begin{aligned} \bar{N}_{q,q'} &= \langle F | \hat{d}_q^+ \hat{d}_q \hat{d}_{q'}^+ \hat{d}_{q'} | F \rangle \\ &= \bar{N}_q \cdot \bar{N}_{q'} - \left| \sum_{r < F} a_{rq}^* a_{rq'} \right|^2 . \end{aligned} \quad (23)$$

Die Ergebnisse (21) - (23) zeigen, daß zusätzlich zur rein zufälligen Koinzidenz ein Korrelationsterm mit interferierenden Übergangsamplituden auftritt. Für Zwei-Teilchen- oder Zwei-Loch-Erzeugung ist dieser Beitrag negativ, es werden weniger Paare angeregt, als man durch rein statistische Koinzidenz erwarten würde. Im Gegensatz dazu ist der Korrelationsterm bei Teilchen-Loch-Erzeugung positiv. Das ist auch verständlich, da direkte Übergänge zwischen p und q möglich sind. Im Grenzfall schwacher Anregungen ($a_{rs} \ll 1$ für $r \neq s$, $a_{rr} \approx 1$) wird daher der zweite Term in (21) dominant. Während alle anderen Beiträge die kleinen Amplituden a_{rs} ($r \neq s$) in vierter

Ordnung enthalten, ist der dominante Term $|a_{qp}^* a_{qq}|^2 \approx |a_{qp}|^2$ quadratisch.

Gl. (21) sollte angewandt werden, um Koinzidenzexperimente zu analysieren wie etwa die gegenwärtig durchgeführten gleichzeitigen Messungen von Delta-Elektronen und charakteristischer Röntgenstrahlung. Es ist allerdings zu beachten, daß das Resultat etwas modifiziert wird, wenn mehrere inkohärent behandelte Kanäle beitragen, die in der Messung nicht unterschieden werden. Zum Beispiel koppeln in den später präsentierten Rechnungen zur elektronischen Coulombanregung (Rotationskopplung und magnetische Effekte werden vernachlässigt) die beiden Spin-Zustände nicht miteinander. Wenn bei der Messung der Elektron-Loch-Koinzidenzrate keine Polarisierungen unterschieden werden, ist daher über die möglichen Spin-Kombinationen zu summieren. Das ergibt

$$\begin{aligned} N_{p,q}^{\text{tot}} &= N_{p\uparrow,q\uparrow} + N_{p\uparrow,q\downarrow} + N_{p\downarrow,q\uparrow} + N_{p\downarrow,q\downarrow} \\ &= 2 N_{p,q}^0 + 2 N_p^0 \bar{N}_q^0 \end{aligned} \quad (24)$$

wobei die $N_{p,q}^0$, N_p^0 , $\bar{N}_q^0$ aus (15), (16), (21) für eine Spinrichtung berechnet werden.

Offenbar liefert die Berücksichtigung des Spins nicht nur eine Verdopplung der Koinzidenzrate sondern einen weiteren statistischen Term. In Fällen wo dieser Beitrag dominiert, kann er die Koinzidenzmessung wertlos machen, da er keine über die Einzelmessungen hinausgehende Information enthält. Insbesondere können δ -Elektron-Loch-Messungen durch statistische Koinzidenzen mit (im gleichen Stoß erzeugten) Elektronen aus hö-

heren Schalen überlagert werden.

Die Ergebnisse dieses und des letzten Abschnitts können auch ohne Benutzung der zweiten Quantisierung gewonnen werden. Für die Einfachanregungen (Gl.(15)) ist das Ergebnis schon länger bekannt^{72),73)}. Das Resultat für Korrelationen wurde kürzlich unabhängig auch von Reading et al. abgeleitet⁷⁴⁾. Im Anhang B wird auf diese Ableitung eingegangen. Wir betonen jedoch, daß der hier verwandte Formalismus zur Beschreibung der Elektron-Positron-Paarerzeugung unumgänglich ist. Auch läßt er sich auf den Fall wechselwirkender Teilchen verallgemeinern.

3) Stöße mit statistisch angeregtem Anfangszustand

Bisher wurde angenommen, daß sich das System vor dem Stoß in einem bestimmten Zustand befand, der durch eine scharf definierte "Fermikante" beschrieben wird. (Der Satz der anfänglich gefüllten Niveaus ist dabei beliebig wählbar und muß nicht durch die Bindungsenergien bestimmt sein.) Unter den üblichen experimentellen Bedingungen (teilweise gestripptes Projektilion, Benutzung eines Festkörpertargets mit der Möglichkeit von Vielfachstößen) ist es realistischer davon auszugehen, daß die Anfangspräparation nicht scharf definiert ist, sondern daß ein gemischter Zustand vorliegt. Dann muß die Anregung durch eine Überlagerung im Sinne einer Dichtematrix berechnet werden.

Betrachten wir etwa die Erzeugung von Teilchen in einem Niveau p . Der Anfangszustand sei ein Gemisch von Vielteil-

chenzuständen $|F_n\rangle$ mit den statistischen Wahrscheinlichkeiten $w^{(n)}$. F_n bedeutet dabei die "Fermi-Menge" der einzelnen besetzten Niveaus. Dann ist der Erwartungswert der Zahl der erzeugten Teilchen

$$\begin{aligned} N_p &= \langle \hat{b}_p^+ \hat{b}_p \rangle = \sum_n w^{(n)} \langle F_n | \hat{b}_p^+ \hat{b}_p | F_n \rangle \\ &= \sum_n w^{(n)} \sum_{r \in F_n} |a_{rp}|^2. \end{aligned} \quad (25)$$

Die n -Summation läuft über alle denkbaren Konfigurationen F_n , auch die Anzahl der Elektronen ist dabei variabel. In der zweiten Zeile wurde (15) benutzt.

Als naheliegendes, wenn auch nicht unbedingt völlig realistisches Beispiel betrachten wir den Fall, daß das Ensemble der unterschiedlich angeregten und vorionisierten Ionen durch eine thermische Verteilung beschrieben werden kann. Die Gewichtungsfaktoren $w^{(n)}$ sind aus der statistischen Mechanik⁷⁵⁾ bekannt als ein Produkt von Exponentialfaktoren

$$w^{(n)} = \frac{\prod_l e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu) \nu_l^{(n)}}}{\prod_l (1 + e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)})} \quad (26)$$

Dabei läuft der Index l über alle verfügbaren Niveaus,

$\varepsilon_l - \mu$ ist die entsprechende Energie (vor dem Stoß) relativ zum chemischen Potential μ und $\beta = 1/kT$ ist die reziproke Temperatur, multipliziert mit dem Boltzmann-Faktor. $\nu_l^{(n)}$ bezeichnet den Besetzungsfaktor ($= 0$ oder 1) des l ten Niveaus für die Vielteilchenkonfiguration n .

Gl. (25) lautet dann

$$\begin{aligned}
 N_p &= \frac{1}{\prod_e (1 + e^{-\beta(\epsilon_e - \mu)})} \sum_n \left[\left(\prod_c e^{-\beta(\epsilon_c - \mu) \nu_c^{(n)}} \right) \sum_{r \in F_n} |a_{rp}|^2 \right] \\
 &= \frac{1}{\prod_e (1 + e^{-\beta(\epsilon_e - \mu)})} \left\{ \left(e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)} |a_{1p}|^2 + e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu)} |a_{2p}|^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \dots \right) + \left(e^{-\beta(\epsilon_1 - \mu)} e^{-\beta(\epsilon_2 - \mu)} (|a_{1p}|^2 + |a_{2p}|^2) + \dots \right) \right. \\
 &\quad \left. + \dots \right\}
 \end{aligned}$$

wobei die ersten Glieder der Summe über die Konfigurationen n hingeschrieben wurden. Dieser Ausdruck läßt sich umordnen nach den Amplitudenquadraten $|a_{rp}|^2$. Man findet

$$\begin{aligned}
 N_p &= \frac{1}{\prod_e (1 + e^{-\beta(\epsilon_e - \mu)})} \sum_r |a_{rp}|^2 e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)} \prod_{e \neq r} (1 + e^{-\beta(\epsilon_e - \mu)}) \\
 &= \sum_r |a_{rp}|^2 \frac{e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)}}
 \end{aligned}$$

und schließlich

$$N_p = \sum_r |a_{rp}|^2 \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_r - \mu)}} \quad (27)$$

Wie auch schon zu erwarten war erhält man also wieder eine Summe über Einteilchen-Übergangswahrscheinlichkeiten, gewichtet jedoch mit dem Besetzungsfaktor (für den Anfangszustand r) aus der Fermi-Dirac-Statistik. Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ geht (27) genau in (15) mit einer scharfen Fermikante über. Die übrigen Resultate der beiden letzten Abschnitte lassen sich ganz analog verallgemeinern. So erhält man für die Locherzeugung

$$\bar{N}_q = \sum_r |a_{rq}|^2 \frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)}} = 1 - N_q \quad (28)$$

Ein einfaches Ergebnis der Gestalt (27), (28) ist nicht auf die thermische Verteilung beschränkt, sondern gilt allgemein, wenn sich die Wahrscheinlichkeiten $w^{(n)}$ in Produkte von Einteilchenwahrscheinlichkeiten faktorisieren lassen.

IV) Wellenfunktionen und Matrixelemente

1) Die Monopolnäherung

In den letzten Kapiteln wurde allgemein der Formalismus zur Berechnung von elektronischen Anregungen im Schwerionenstoß entwickelt. Um dynamische Rechnungen durchzuführen ist die Kenntnis der Wellenfunktionen, Bindungsenergien und Kopplungsmatrixelemente erforderlich. Soll im quasimolekularen Modell gerechnet werden, dann muß für alle internuklearen Abstände die stationäre Diracgleichung mit zwei Coulombzentren gelöst werden. Zwischen den resultierenden Born-Oppenheimer-Basiszuständen sind entsprechend (II.15) die Matrixelemente der Operatoren $\partial/\partial R$ und j_y (wenn man die Trajektorie der Kerne in die xz -Ebene legt) zu berechnen. Wir werden im folgenden kurz auf die allgemeine Lösung dieser Aufgabe eingehen und uns dann auf eine Näherung stützen, die das Problem wesentlich vereinfacht und für die interessierende Innerschalen- und Paar-anregung in sehr schweren Stoßsystemen anwendbar ist.

Die Schrödingergleichung für ein Elektron im Feld zweier Coulombzentren ist eines der Standardprobleme der Quantenmechanik und wurde schon früh, etwa von Hylleraas, von Teller u. a. behandelt. Die Lösung vereinfacht sich dadurch wesentlich, daß die Zwei-Zentren-Schrödingergleichung (etwa in prolat sphäroidalen Koordinaten) in zwei gewöhnliche Differentialgleichungen separiert. Für die Zwei-Zentren-Diracgleichung

$$\left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m - \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} \right) \psi = E \psi \quad (1)$$

ist dies nicht möglich. Hier läßt sich nur noch die Abhängigkeit vom Azimutalwinkel φ abspalten, im übrigen ist eine zweidimensionale partielle Differentialgleichung zu lösen. Dies wurde zuerst von B. Müller mit Hilfe eines numerischen Diagonalisationsverfahren erreicht^{76),28),29)}. Als praktisch günstiger hat sich die Diskretisierung der Winkelabhängigkeit von Ψ durch eine Multipolentwicklung erwiesen³⁰⁾:

$$\Psi_{\mu}(\vec{r}) = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu} \\ i f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (2)$$

mit den Kugelspinoren

$$\chi_{\kappa}^{\mu} = \sum_{m=\pm 1/2} (1 \frac{1}{2} j \mu - m m \mu) Y_{1,\mu-m} \chi^m. \quad (3)$$

κ und μ sind die üblichen Drehimpulsquantenzahlen. Das Zweizentrenpotential wird ebenfalls entwickelt

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{\ell} V_{\ell}(r, R) P_{\ell}(\cos \vartheta) \quad , \quad (4)$$

wobei Zylindersymmetrie bezüglich der z-Achse vorausgesetzt wurde. Die Diracgleichung ist dann äquivalent zu einem unendlichen Satz gekoppelter Differentialgleichungen in der Radialkoordinate r :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} f_{\kappa}(r) &= \frac{\kappa-1}{r} f_{\kappa}(r) - (E-m)g_{\kappa}(r) + \sum_{s \ell} g_s(r) V_{\ell}(r, R) A_{\kappa \ell s} \\ \frac{d}{dr} g_{\kappa}(r) &= (E+m)f_{\kappa}(r) - \frac{\kappa+1}{r} g_{\kappa}(r) - \sum_{s \ell} f_s(r) V_{\ell}(r, R) A_{\kappa \ell -s} \end{aligned} \quad (5)$$

und den Drehimpuls-Koeffizienten $A_{\kappa \ell s} = \langle \chi_{\kappa}^{\mu} | P_{\ell} | \chi_s^{\mu} \rangle$. Es stellt sich heraus, daß es genügt, sich bei der Lösung von (5)

auf eine relativ kleine Anzahl von Multipolkomponenten ($\lesssim 5$) zu beschränken. Das verbleibende endliche Differentialgleichungssystem läßt sich numerisch integrieren und liefert - wenn man das asymptotische Verschwinden von ψ bei großen Abständen fordert - für jeden Abstand R das Spektrum der gebundenen Zustände. Ausführliche Rechnungen dazu wurden von W. Betz durchgeführt⁷⁷⁾. Abb. 4 zeigt die Korrelationsdiagramme der Systeme Pb - Pb und U - U. Besonders bemerkenswert ist das steile Anwachsen der Bindungsenergie der $ns_{\frac{1}{2}}$ und $np_{\frac{1}{2}}$ Niveaus bei kleinen Abständen. Wie früher schon diskutiert ist dieser Effekt auf die relativistische Kontraktion der Wellenfunktionen zurückzuführen und tritt nur bei sehr schweren Stoßsystemen auf. Die rasche Veränderung in ψ führt in diesen Systemen zu starken radialen Kopplungen bei kleinen Abständen R .

Es zeigt sich nun, daß in diesem Bereich das Verhalten der Wellenfunktionen im wesentlichen durch einen einzigen Multipol bestimmt wird. Bindungsenergien und Matrixelemente werden allein durch Beschränkung auf den Monopolanteil V_0 des Potentials überraschend gut wiedergegeben. So findet man für die Bindungsenergie der niedrigsten $ns_{\frac{1}{2}}$ -Niveaus im Pb - Pb - System Abweichungen vom exakten Ergebnis von wenigen Prozent für Kernabstände bis 500 fm. Ähnliches gilt für die radialen Matrixelemente. Auch findet man, daß in leicht asymmetrischen Systemen die Energien und Kopplungen nur von der Gesamtladung $Z_1 + Z_2$ abhängen. Nähere Untersuchungen dazu wurden in Ref. 78) angestellt.

Während die Monopolnäherung nicht in der Lage ist, das komplizierte Verhalten der Zustände in höheren Schalen oder bei

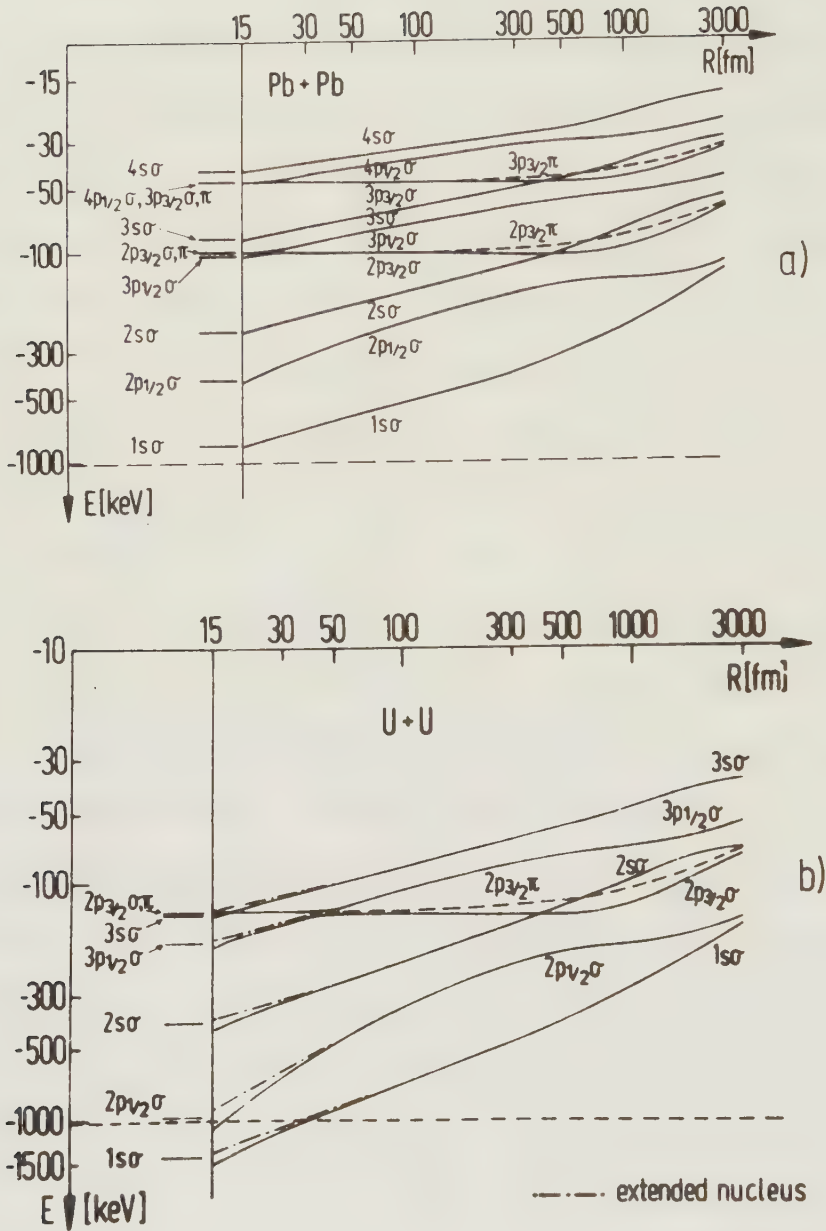


Abb. 4 : Adiabatische Korrelationsdiagramme für die Systeme $Pb-Pb$ und $U-U$, erhalten durch numerische Lösung der Zwei-Zentren-Diracgleichung nach Ref. 59). Berechnet von W. Betz (Ref. 77) .

größeren Kernabständen zu beschreiben, ist sie zur Berechnung der in dieser Arbeit interessierenden radialen Anregungen von tief gebundenen Zuständen mit Drehimpulsquantenzahl $\mathcal{L} = \pm 1$ gut geeignet.

Der besondere Wert der Monopolnäherung rührt neben ihrer rechnerischen Einfachheit daher, daß es bisher im Gegensatz zum nichtrelativistischen Fall⁷⁹⁾ nicht gelungen ist, die Zweizentren-Diracgleichung im Kontinuum zu lösen. Das Problem liegt hauptsächlich in der asymptotischen ($r \rightarrow \infty$) Klassifikation der Wellenfunktionen. Reduziert man jedoch das Potential auf seinen sphärisch symmetrischen Anteil, dann bietet dies keine Schwierigkeiten. Da für die hier interessierenden Prozesse der Ionisation und Positronenerzeugung das Kontinuum eine wichtige Rolle spielt, ist die Benutzung der Monopolnäherung daher eine entscheidende Vereinfachung.

Die Corioliskopplung $\omega \cdot j_y$ kann in der Monopolnäherung nicht sinnvoll beschrieben werden. Die entsprechenden Matrixelemente $\langle \varphi_2 | j_y | \varphi_1 \rangle$ existieren wegen der Orthogonalität der Radialwellenfunktionen nur, wenn φ_1 und φ_2 zum gleichen Zustand mit unterschiedlicher Magnetquantenzahl ($\Delta \mu = \pm 1$) gehören und sind dann für alle R konstant. Es läßt sich leicht zeigen, daß die Rotationskopplung vernachlässigt werden kann, wenn man nicht zwischen diesen Unterzuständen unterscheidet. Durch die unitäre Transformation der Basiszustände

$$|\varphi_i'\rangle = e^{i \theta(t) j_y} |\varphi_i\rangle \quad (6)$$

mit dem Drehwinkel $\theta(t) = \int_{-\infty}^t dt' \omega(t')$ der internuklearen Achse läßt sich der Kopplungsterm $-i\omega j_y$ aus den gekoppel-

ten Differentialgleichungen (II.12) eliminieren. Die restlichen Terme bleiben unverändert, wenn $H = e^{-i\theta j_y} H e^{+i\theta j_y}$ gilt, wenn also der Hamiltonoperator mit j_y kommutiert. Wegen der sphärischen Symmetrie des Potentials $V_0(r,R)$ ist dies in der Monopolnäherung erfüllt. Mit anderen Worten heißt dies: in Monopolnäherung ist die Transformation ins mitrotierende System überflüssig.

2) Berechnung der Wellenfunktionen

In Monopolnäherung reduziert sich die Diracgleichung auf das wohlbekannte ^{80),81)} System zweier gekoppelter radialer Differentialgleichungen (mit $u_1 = g_0/r$, $u_2 = f_0/r$) :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} u_1 &= -\frac{\mathcal{E}}{r} u_1 + (E+m-V_0) u_2, \\ \frac{d}{dr} u_2 &= -(E-m-V_0) u_1 + \frac{\mathcal{E}}{r} u_2. \end{aligned} \quad (7)$$

Der Monopolanteil des Potentials lautet (wir beschränken uns im folgenden auf symmetrische Systeme $Z_1 = Z_2$, der Koordinatenursprung wird in die Mitte zwischen die beiden Zentren gelegt):

$$V_0(r,R) = \begin{cases} -\frac{(Z_1+Z_2)e^2}{R/2} & r \leq R/2 \\ \frac{(Z_1+Z_2)e^2}{r} & r > R/2 \end{cases} \quad \text{für} \quad (8)$$

wenn man von einer punktförmigen Ladungsverteilung der Kerne ausgeht. Gl. (8) entspricht dem Potential einer homogen geladenen Kugelschale vom Radius $R/2$. Da die Wellenfunktionen in der Nähe der Kerne stark lokalisiert werden ist es wichtig,

die Abschwächung des Potentials infolge der endlichen Kernaussdehnung zu berücksichtigen. Den Monopolanteil des Potentials erhält man dabei am einfachsten durch Integration der Poissongleichung

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} V_0 = -4\pi \rho_0(r) . \quad (9)$$

mit der radialsymmetrisch gemittelten Ladungsdichte $\rho_0(r)$. Am einfachsten nimmt man als Modell für die Ladungsverteilung der Kerne eine homogen geladene Kugel mit dem Radius R_n . Das resultierende Potential lautet

$$V_0(r, R) = \begin{aligned} & - \frac{(Z_1 + Z_2) e^2}{R/2} && \text{für } r < R_- \\ & - \frac{(Z_1 + Z_2) e^2}{8 R_n^3 R} \left[r^4 - 2 R r^3 + 6 R_+ R_- r^2 - \right. \\ & \quad \left. - 4 R_+^2 (R_- - R_n) r + R_-^3 (R_+ + 2 R_n) \right] && \text{für } R_- \leq r \leq R_+ \\ & - \frac{(Z_1 + Z_2) e^2}{r} && \text{für } r > R_+ \end{aligned} \quad (10)$$

mit $R_{\pm} = R/2 \pm R_n$. Als Ladungsradius der Kerne nimmt man an $R_n = r_0 A^{1/3}$ mit $r_0 \approx 1.2$ fm. Die vollständige Multipolentwicklung findet man in Ref. 82).

Falls sich die Kerne überlappen, also $R/2 < R_n$, dann muß der Ausdruck für das Potential modifiziert werden. Die analytische Lösung aus Gl. (10) läßt sich erweitern, wenn man vereinfachend annimmt, daß sich die Kerne im Überlappbereich einfach zur doppelten Dichte überlagern (sudden-Näherung). Es läßt sich zeigen, daß dann im Innenbereich gilt

$$V_0(r, R) = - \frac{(Z_1 + Z_2) e^2}{2 R_n} \left(3 - \frac{r^2 + (R/2)^2}{R_n^2} \right) \quad \text{für } r < R_n - R/2$$

Die beiden anderen Anteile in (10) bleiben unverändert, wobei sich natürlich die Gültigkeitsgrenzen des mittleren Bereichs auf $R_n - R/2 \leq r \leq R_n + R/2$ abändern.

Mit dem Potential (10) muß das gekoppelte Differentialgleichungssystem (7) numerisch gelöst werden. Als Startlösung kann man wegen (10) bzw. (8) solange sich die Kerne nicht überlappen die exakten Diracwellenfunktionen im konstanten Potential $V = -(Z_1 + Z_2) e^2 / (R/2)$ verwenden, und zwar gilt für $(E - V)^2 > m^2$

$$\begin{aligned} u_1^i &= c r j_{l_1}(pr) \\ u_2^i &= c \operatorname{sgn}(\kappa) \frac{pr}{E - V + m} j_{l_2}(pr) \end{aligned} \quad (12)$$

mit $l_1 = |\kappa| + \frac{1}{2} (\operatorname{sgn}(\kappa) - 1)$, $l_2 = l_1 - \operatorname{sgn}(\kappa)$ und $p = \sqrt{(E - V)^2 - m^2}$. Im Falle $(E - V)^2 < m^2$ lautet die Startwellenfunktion

$$\begin{aligned} u_1^i &= c r \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} I_{l_1+1/2}(kr) \\ u_2^i &= c \frac{kr}{E - V + m} \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} I_{l_2+1/2}(kr) \end{aligned} \quad (12)$$

mit $k = \sqrt{m^2 - (E - V)^2}$. $j_l(x)$ und $I_l(x)$ sind die üblichen sphärischen und modifizierten Besselfunktionen.

Das System (7) wurde für gebundene Zustände mit einem Adams-Moulton Prädiktor-Korrektor-Verfahren mit 500 logarithmisch verteilten Stützstellen integriert. Durch Iteration der Energiewerte wurden Eigenlösungen gesucht, deren Wellenfunktionen bei großen r exponentiell abfallen. Die resultierende Abhängigkeit der Bindungsenergie ist in Abb. 5 für die

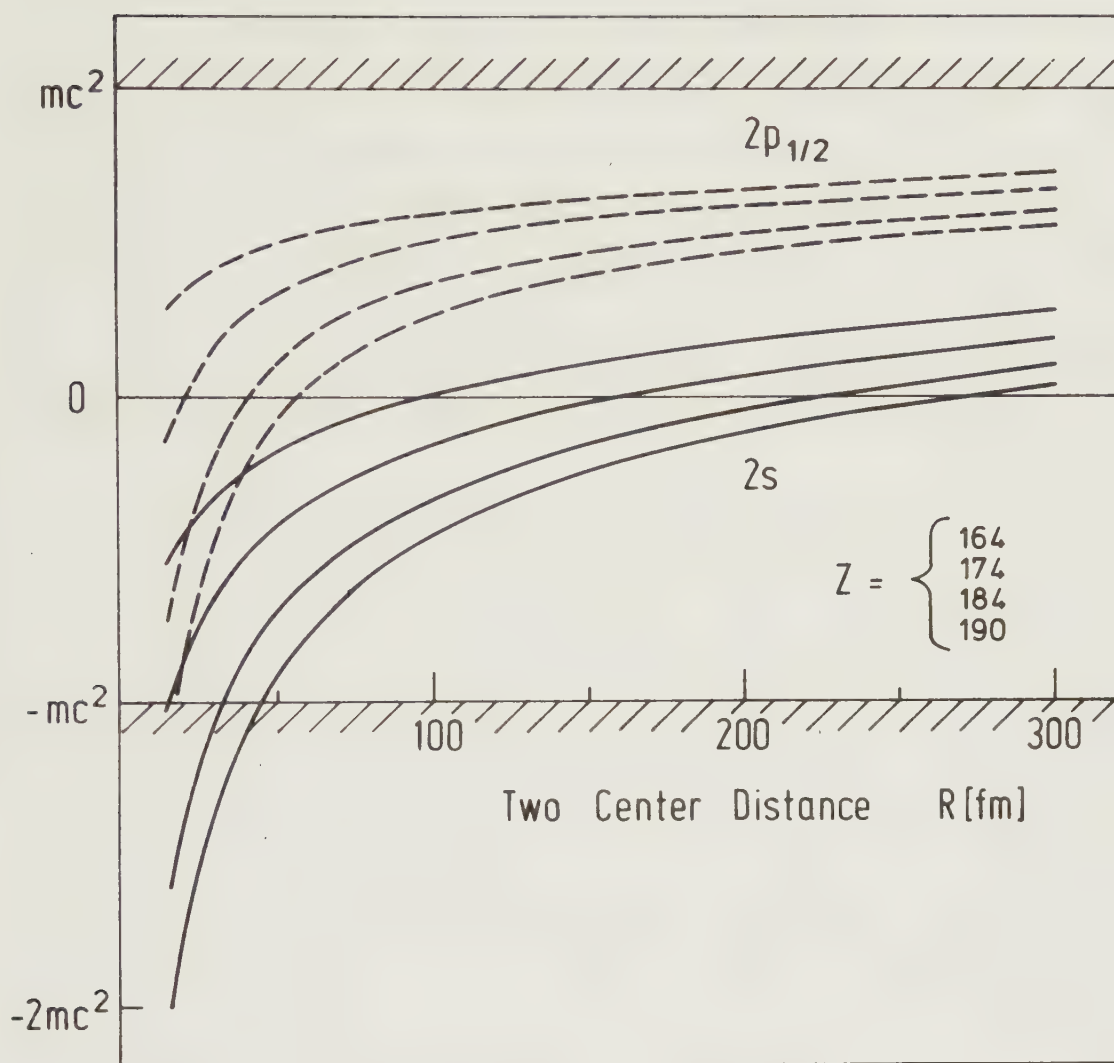


Abb. 5 : Die Energien der Zustände $1s$ und $2p_{1/2}$ als Funktion des Zweizentrenabstandes R in den Systemen Pb-Pb, Pb-U, U-U, U-Cf, berechnet in Monopolnäherung mit Berücksichtigung der endlichen Kernaushnung.

1s $\bar{5}$ - (durchgezogen) und 2p $\frac{1}{2}\bar{5}$ - (gestrichelt) Niveaus der Systeme mit $Z = 164, 174, 184, 190$ (entsprechend Pb-Pb, Pb-U, U-U, U-Cf -Stößen) dargestellt. Im Eintauchbereich ($E_n < -1$) wurde ein in Kap. VII näher zu besprechendes Abschneideverfahren der Wellenfunktion verwendet. Die höherliegenden Niveaus, für spätere Anwendungen berechnet bis zum 8s $\bar{6}$, verlaufen flacher mit R . Ihre Beschreibung ist sicher nicht sehr realistisch, da in Monopolnäherung Kreuzungen mit den sehr zahlreichen anderen Niveaus nicht auftreten. Außerdem werden die schwächer gebundenen Niveaus durch Abschirmung sehr stark verändert.

Zur Bestimmung von Kontinuumslösungen genügt es, die Differentialgleichungen (7) bis zum Abstand R_+ zu integrieren. Da nur in diesem Bereich das Potential vom $1/r$ -Verlauf abweicht kann bei $r = R_+$ die numerisch bestimmte Wellenfunktion (genauer das Verhältnis $u_1^i(R_+)/u_2^i(R_+)$) an die analytisch bekannte Coulombwelle ^{83),84)} angepasst werden. Dadurch wird die richtige Normierung der Kontinuumswellenfunktion auf δ -Funktion in der Energieskala

$$\langle \psi_{E'} | \psi_E \rangle = \delta(E' - E) \quad (13)$$

sichergestellt. Die Asymptotik der Wellenfunktion lautet

$$\begin{aligned} u_1 &\sim \sqrt{\frac{|E| + m}{\pi p}} \cos (pr + \Delta + \delta_{ph}) \\ u_2 &\sim \mp \sqrt{\frac{|E| \mp m}{\pi p}} \sin (pr + \Delta + \delta_{ph}) \end{aligned} \quad (14)$$

mit der Coulomb-Streuphase

$$\Delta = y \left(\ln \frac{2pr}{|y|} + 1 \right) + \frac{\pi}{4} \quad (15)$$

wobei $y = Z\alpha E/p$, $p = \sqrt{E^2 - m^2}$. Die Vorzeichen gelten für $\pm E > m$. δ_{ph} ist die physikalische Phasenverschiebung, die durch den Verlauf des Potentials bei kleinen Abständen bestimmt wird.

Die Berechnung der radialen Kopplungsmatrixelemente wird wesentlich erleichtert durch Anwendung des "Hellmann-Feynman-Theorems", das allgemein für die Differentiation nach einem Parameter gilt

$$\begin{aligned} \langle \varphi_2 | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_1 \rangle &= \frac{1}{E_1 - E_2} \langle \varphi_2 | \left[\frac{\partial}{\partial R}, H \right] | \varphi_1 \rangle \\ &= \frac{1}{E_1 - E_2} \langle \varphi_2 | \frac{\partial H}{\partial R} | \varphi_1 \rangle \quad . \quad (16) \end{aligned}$$

Da $\partial H / \partial R = \partial V / \partial R$ für $r \geq R_+$ verschwindet werden die Wellenfunktionen nur im Innenbereich benötigt.

Im Zusammenhang mit den Rechnungen in Kap. VII. wurde die Wellenfunktion mit (14) numerisch bei großem r normiert und das Matrixelement (16) durch direkte numerische Differentiation berechnet, beides in guter Übereinstimmung mit dem obigen Verfahren.

3) Die radialen Matrixelemente

In Stoßsystemen mit hoher Gesamtladung $Z = Z_1 + Z_2$ der Kerne werden die elektronischen Wellenfunktionen durch relativistische Kontraktion bei kleinen Kernabständen stark deformiert. Dies macht sich besonders bemerkbar bei Zuständen mit $|\kappa| = 1$, also $ns\sigma$ und $np\frac{1}{2}\sigma$. Das Anwachsen der Elektronendichte in Kernnähe führt zu starken $\partial/\partial R$ -Kopplungen. Dies sieht man unmittelbar aus Gl. (16), die sich (für Punktkerne) schreiben läßt

$$\langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_i \rangle = \frac{1}{E_i - E_f} \frac{2(Z_1 + Z_2)e^2}{R^2} \int_0^{R/2} dr (u_1^f u_1^i + u_2^f u_2^i) \quad (17)$$

sodaß das Matrixelement proportional zum Überlapp der Wellenfunktion im Innenbereich $r < R/2$ ist.

In den Abbildungen 6 bis 9 wird der Verlauf der radialen Kopplungen dokumentiert. Sie wurden alle in Monopolnäherung für symmetrische Systeme und unter Berücksichtigung des endlichen Kernradius berechnet. Es werden natürliche Einheiten verwendet, d. h. Längen werden in Vielfachen der Comptonwellenlänge λ_e und Energien in Ruhmasseneinheiten $m_e c^2$ angegeben.

Fig. 6 zeigt die Kopplung des $1s\sigma$ -Zustands zu verschiedenen Zuständen des oberen Kontinuums für das Pb-Pb System ($Z = 164$)⁸⁵⁾. Das Anwachsen bei kleinen R dominiert den Verlauf der Matrixelemente und ist für die gezeigten Übergänge etwa gleich ausgeprägt. Ohne Berücksichtigung der endlichen Kernaussdehnung wachsen die Matrixelemente bei kleinen Abständen noch stärker an (gestrichelte Linien), Abweichungen bis

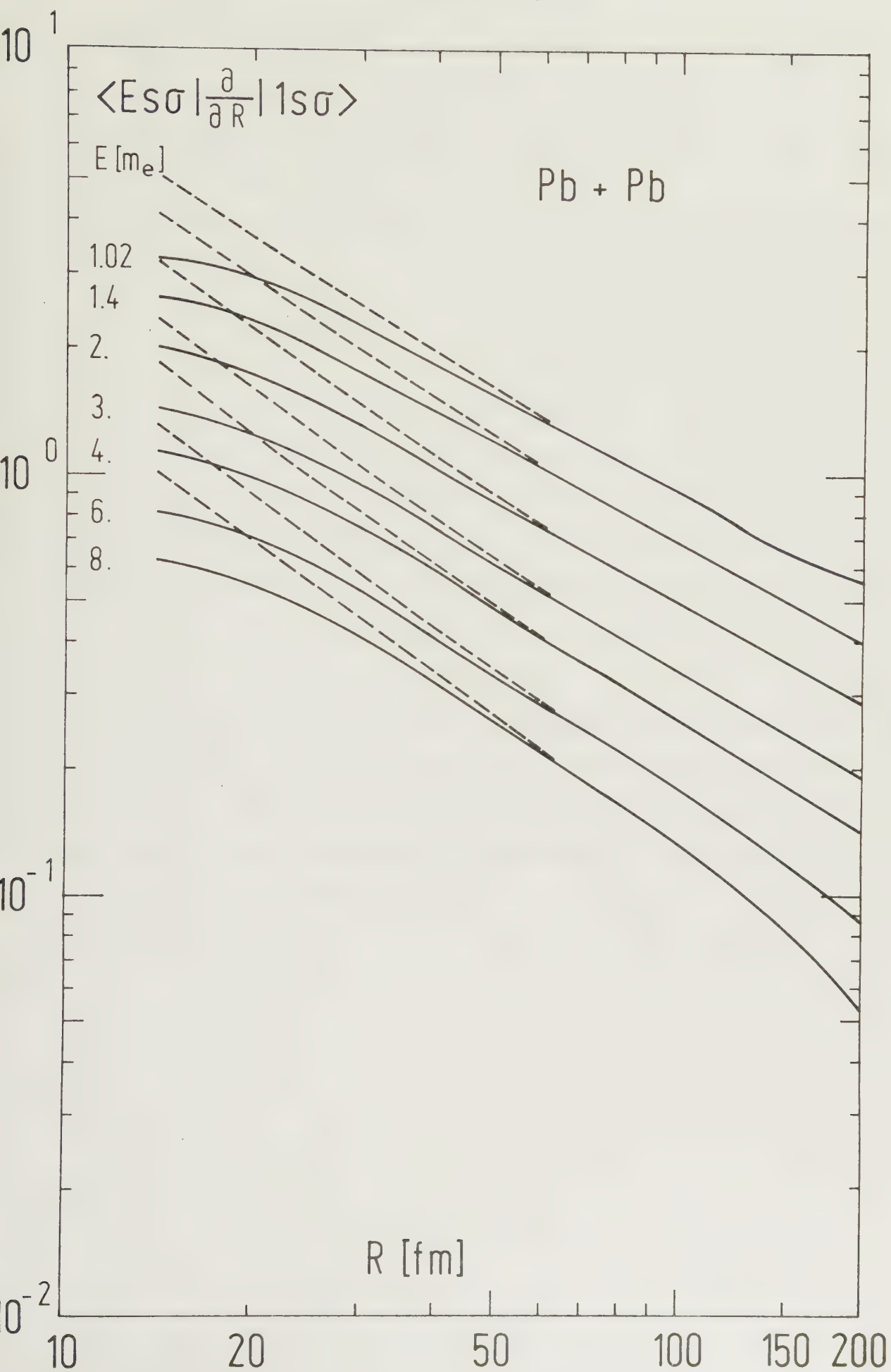


Abb. 6 : Radiale Kopplungsmatrixelemente für die Ionisation des molekularen $1s\sigma$ -Niveaus in Zustände des elektronischen Kontinuums mit verschiedenen Energie E_e . Rechnung in Monopolnäherung mit Berücksichtigung der endlichen Kernaushdehnung und für Punktkerne (gestrichelt). Der Anstieg bei kleinem Kernabstand R ist auf die Kontraktion der Wellenfunktionen im starken Coulombfeld zurückzuführen.

zu 30% treten auf. Die Kopplung zwischen verschiedenen gebundenen Zuständen verläuft ähnlich. Mit steigender Hauptquantenzahl des Endzustandes n_{56} fällt $|\langle \varphi_{n_{56}} | \partial/\partial R | \varphi_{156} \rangle|^2$ etwa proportional $(\Delta n)^{-2}$ ab.

Die nächsten Figuren zeigen Kopplungen zum unteren Kontinuum. Fig. 7 gibt den Verlauf $\langle \varphi_{E_p} | \partial/\partial R | \varphi_n \rangle$ für $\mathcal{L} = \pm 1$ in den Systemen $Z = 164$ und 174 wieder. Der steile Anstieg bei sehr kleinen Abständen ($R \lesssim 50$ fm) ist noch ausgeprägter und hängt von der Positronenenergie E_p ab. Hier macht sich der Energienenner in (17) bemerkbar. Der Zahlenwert der Matrixelemente zur induzierten Positronenerzeugung $\langle \varphi_{E_p} | \partial/\partial R | \varphi_n \rangle$ liegt um etwa eine Größenordnung unter den Ionisationsmatrixelementen $\langle \varphi_n | \partial/\partial R | \varphi_{E_e} \rangle$, was auf die Coulombabstoßung der Positronenwellenfunktionen φ_{E_p} bei kleinen Abständen zurückzuführen ist.

Fig. 8 zeigt das Matrixelement für direkte Paarerzeugung $\langle \varphi_{E_p} | \partial/\partial R | \varphi_{E_e} \rangle$. Berücksichtigt sind "s-Wellen" (durchgezogene Linien) und "p_{1/2}-Wellen" (gestrichelt), die Elektronenenergie ist bei einem sehr kleinen Wert der kinetischen Energie $E_e = 1.02$ festgehalten. Beim Übergang zum etwas höher geladenen System $Z = 174$ steigen die Kurven deutlich an. Man beachte, daß es sich um eine sehr steile Z-Abhängigkeit handelt, da die Änderung in Z nur etwa 6% beträgt. Vergrößerung der Elektronenenergie E_e ändert am prinzipiellen Verlauf der Kurven nichts, es stellt sich nämlich heraus, daß $(E_e - E_p) \langle \varphi_{E_p} | \partial/\partial R | \varphi_{E_e} \rangle$ nahezu unabhängig von E_e ist. Als Funktion von E_p zeigt das Matrixelement eine ausgeprägtere

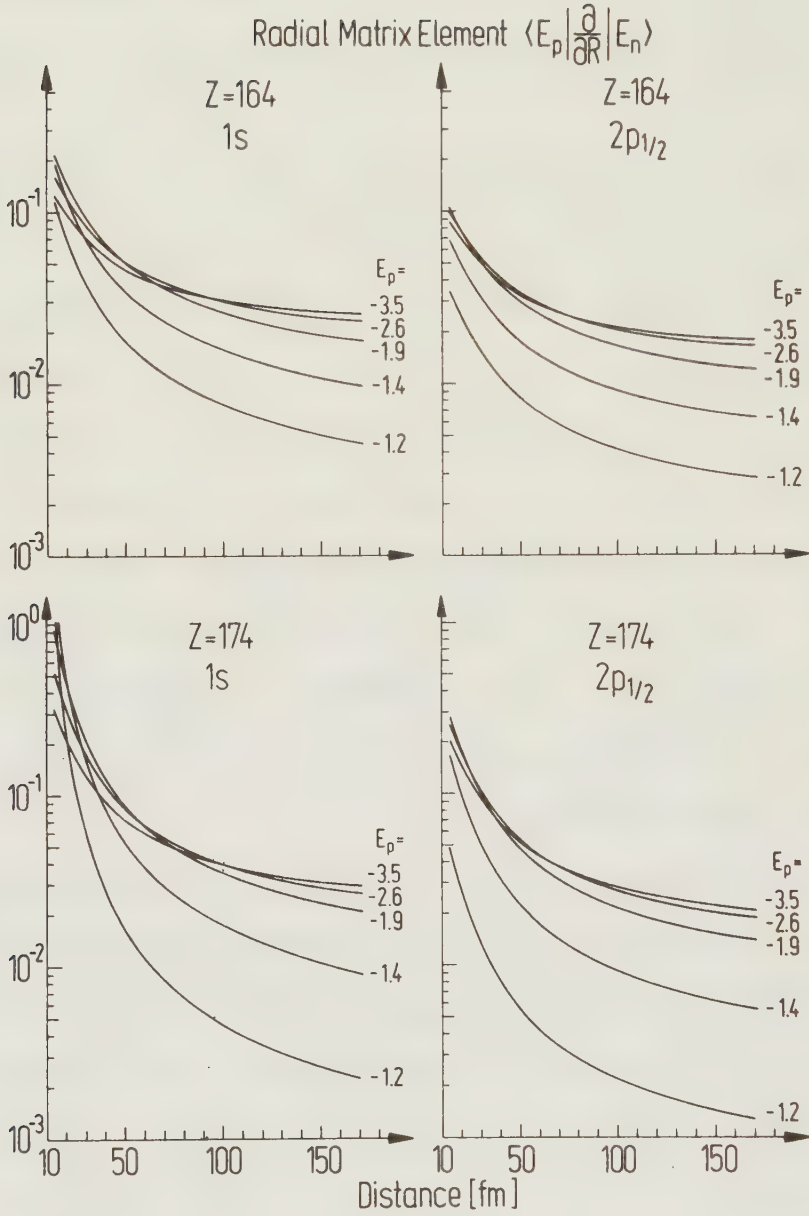


Abb. 7 : Matricelemente für induzierte Positronenerzeugung
 $\langle \psi_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \psi_n \rangle$ aus den Zuständen $1s$ und $2p_{1/2}$
in den Systemen $Z = 164$ und $Z = 174$.

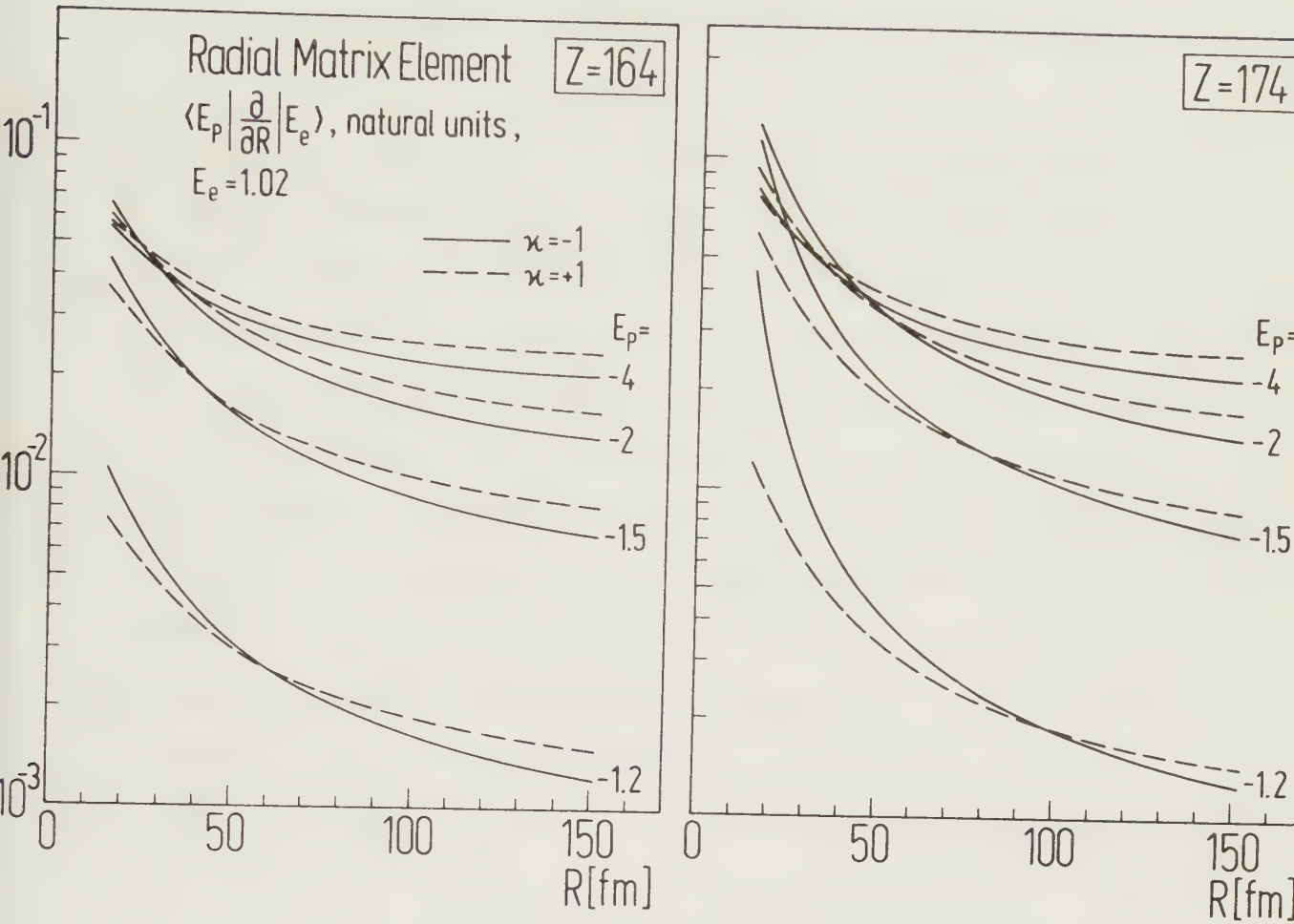


Abb. 8 : Matrixelemente für direkte Paarerzeugung in den Systemen $Z = 164$ und $Z = 174$. Durchgezogen: $s_{1/2}$ -Wellen, gestrichelt: $p_{1/2}$ -Wellen.

Struktur (siehe Fig. 9) , da bei kleinen kinetischen Positronenenergien der Coulomb-Verdrängungsfaktor wirksam wird. Die Werte für $\mathcal{K} = -1$ und $+1$ zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf.

Ein Problem stellen die Übergänge innerhalb der Kontinua dar. Die Matrixelemente $\langle \varphi_{E_e'} | \partial/\partial R | \varphi_{E_e} \rangle$ zeigen im wesentlichen den schon vertrauten Verlauf, fallen allerdings bei größeren Abständen nur sehr schwach ab. Die Kopplung $\langle \varphi_{E_e'} | \partial/\partial R | \varphi_{E_p} \rangle$ hingegen wächst mit R sogar an, zumindest in einem Bereich wo die Monopolnäherung noch zuverlässig sein sollte. Sie ist jedoch sehr schwach und wurde daher in den numerischen Rechnungen in Kap. IX vernachlässigt. Eine zuverlässigere Beschreibung der Übergänge zwischen freien Zuständen setzt eine bessere Erfassung der Kontinuumswellenfunktionen voraus, im Idealfall die Lösung des Zwei-Zentren-Kontinuums mit geeignet konstruierten Translationsfaktoren. Zu dieser Problematik siehe Ref. 49).

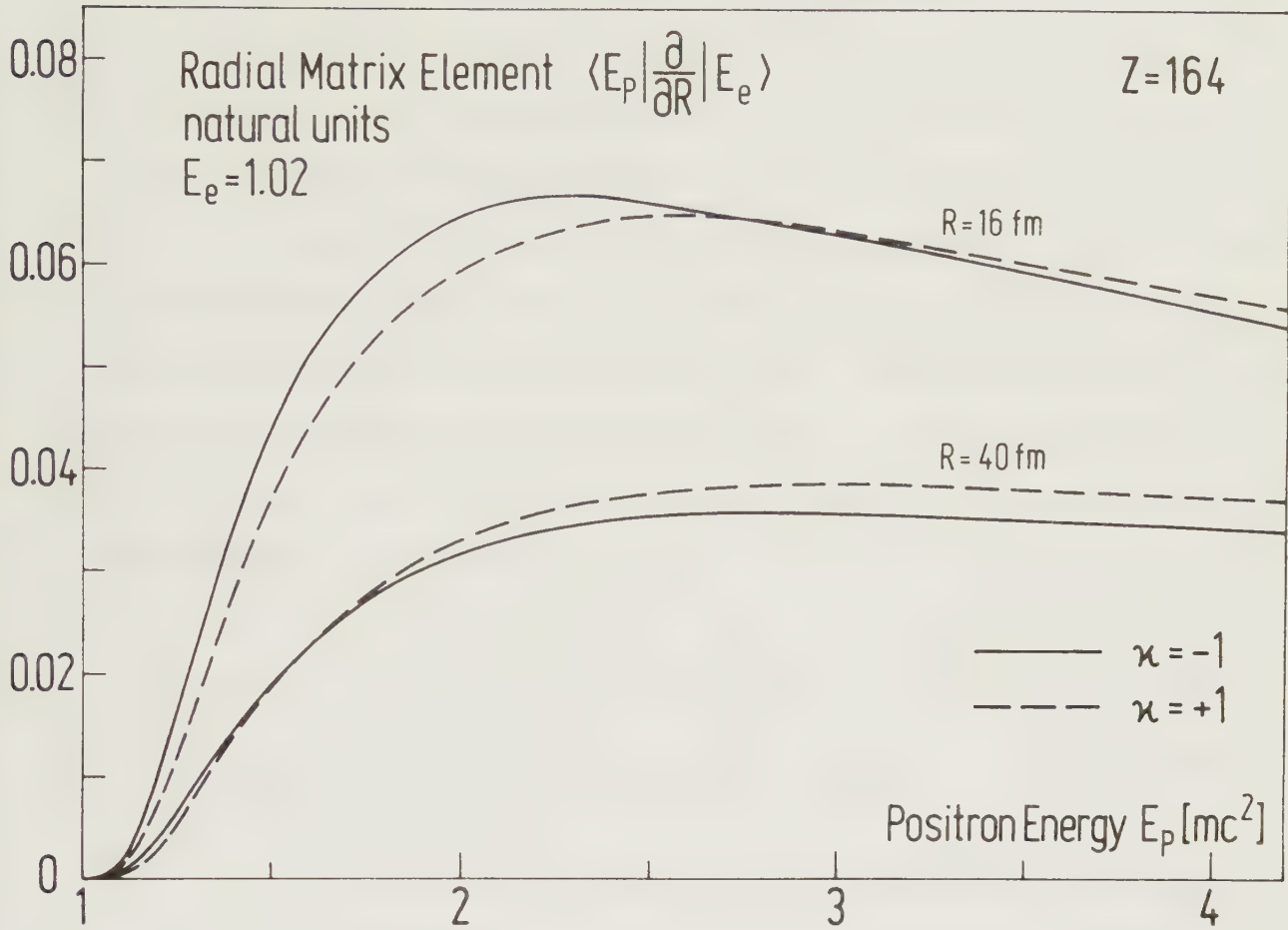


Abb. 9 : Paarerzeugungsmatrixelemente $\langle \varphi_{E_p} | \partial / \partial R | \varphi_{E_e} \rangle$ als Funktion der Positronenenergie für zwei ausgewählte Kernabstände im Pb-Pb-System. Der Abfall bei kleiner kinetischer Energie beruht auf der Coulombabstoßung der Positronenwellenfunktion.

4) Zur Wahl der adiabatischen Basis

Wie in Kap. II erörtert wurde, ist die Wahl der Basis zur Entwicklung der zeitabhängigen Wellenfunktion zunächst völlig freigestellt solange sie nur vollständig ist. Ihre Wahl ist eine Frage der Zweckmäßigkeit; am günstigsten wird diejenige Basis sein, deren Anregungskoeffizienten möglichst klein bleiben. Dies dient einerseits der rechnerischen Bequemlichkeit, da unter Umständen nur wenige Zustände berücksichtigt werden müssen oder das Problem störungstheoretisch gelöst werden kann. Darüber hinaus hat eine "optimal" gewählte Basis eine heuristische Bedeutung, da sie Einsicht in das dynamische Verhalten des Systems vermittelt. Man denke etwa an die Rolle der adiabatischen Basis in sehr langsam verlaufenden Stößen. Im Grenzfall verschwinden hier die Anregungen, während bei Verwendung einer anderen, vielleicht zeitunabhängigen Basis eine komplizierte Überlagerung von Entwicklungstermen auftritt.

In diesem Abschnitt soll die adiabatische Basis in Stößen sehr schwerer Ionen diskutiert und Argumente für ihre (bisher schon vorausgesetzte) Verwendung gegeben werden. Zu diesem Zweck erinnern wir uns, daß bei allgemeiner Basiswahl gleichzeitig Zeitableitungs- und Potentialkopplungen $\partial/\partial t + i H(t)$ auftreten, letztere sind wirksam, wenn die Basiszustände keine Eigenfunktionen von $H(t)$ sind. Eine Möglichkeit, von der adiabatischen Basis abzuweichen besteht nun darin, Eigenfunktionen von H zu einem von $R(t)$ abweichenden Kernabstand zu verwenden

$$H(s) \varphi_n^s(t) = E_n(s) \varphi_n^s(t) . \quad (18)$$

Konstantes ξ bedeutet also, daß die Basis bei einem bestimmten Zweizentrenabstand eingefroren wird, die auftretenden Kopplungsmatrixelemente sind dann $\langle \varphi_2^{\xi} | H(R(t)) - H(\xi) | \varphi_1^{\xi} \rangle$. Es wäre denkbar, daß sich diese Beschreibung als günstiger erweist (schwächere Anregungen) als die adiabatische Basis, wo die Wellenfunktionen gezwungen werden, dem momentan wirk-samen Potential zu folgen.

Um dies zu überprüfen soll die Anregungsstärke vom $1s$ - in andere Zustände berechnet werden. Es soll geprüft werden, wie-viele Zustände berücksichtigt werden müssen, um weitgehende Vollständigkeit der Basis zu erreichen. Die Vollständigkeits-relation liefert bei Benutzung der adiabatischen Basis

$$\langle \varphi_{1s} | \partial^2 / \partial R^2 | \varphi_{1s} \rangle = - \sum_{k \neq 1s} | \langle \varphi_k | \partial / \partial R | \varphi_{1s} \rangle |^2 \quad (19)$$

und bei Benutzung der eingefrorenen ξ -Basis

$$\langle \varphi_{1s}^{\xi} | (\Delta H)^2 | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle = \sum_k | \langle \varphi_k^{\xi} | \Delta H | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle |^2 \quad (20)$$

mit der Abkürzung $\Delta H = H(R) - H(\xi) = V(R) - V(\xi)$. Die Über-einstimmung zwischen linker und rechter Seite in (19), (20) in Abhängigkeit von der Zahl der in der Summe berücksichtig-ten Zustände gibt also an, wie weit die Vollständigkeitsre-lation ausgeschöpft wurde.

Zur numerischen Auswertung wurden die Matrixelemente in Mono-polnäherung für das Pb-Pb -System ($Z = 164$) berechnet. Die zweite Ableitung in (19) mußte durch numerische Differentia-tion mit einer 3-Punkte-Formel berechnet werden und ist mit einer numerischen Ungenauigkeit von etwa 10 % behaftet. Alle

übrigen Matrixelemente sind unproblematisch zu erhalten. Der Zusammenhang zwischen beiden Kopplungsarten wurde anhand der Taylorentwicklung

$$\langle \varphi_2^s | \Delta H | \varphi_1^s \rangle \approx (R-s) \langle \varphi_2^s | \frac{\partial H}{\partial R} | \varphi_1^s \rangle \quad (21)$$

getestet.

Die Tabelle gibt als Beispiel die Ergebnisse bei zwei Kernabständen $R = 16 \text{ fm}$ und $R = 40 \text{ fm}$ wieder.

Tabelle I: Vollständigkeit der adiabatischen und der festgehaltenen Basis im System Pb-Pb

	R = 16 fm	R = 40 fm
$\sum_{\text{bis } B_5} \langle \varphi_k \partial/\partial R \varphi_{15} \rangle ^2$	14.9	3.70
$\sum_{\text{alle } k} \langle \varphi_k \partial/\partial R \varphi_{15} \rangle ^2$	27.3	7.23
$\langle \varphi_{15} \partial^2/\partial R^2 \varphi_{15} \rangle$	32.2	8.34
$\sum_{\text{bis } B_5} \langle \varphi_k^s \Delta H \varphi_{15}^s \rangle ^2$	.027	.0039
$\sum_{\text{alle } k} \langle \varphi_k^s \Delta H \varphi_{15}^s \rangle ^2$	.105	.015
$\langle \varphi_{15}^s (\Delta H)^2 \varphi_{15}^s \rangle$	1.91	.154

Hierbei wurde in der ersten Zeile jeweils über 8 gebundene ns6- Zustände summiert, während die zweite Summe zusätzlich ein Integral über das Kontinuum bis $E_e = 6 \text{ mc}^2$ (ent-

sprechend 2.5 MeV kinetischer Energie) enthält. Die dritte Zeile entspricht dem exakten Wert, d. h. der linken Seite in den Gleichungen (19), (20). In der unteren Hälfte der Tabelle wurde die Basis (für beide R-Werte) bei $\xi = 50$ fm eingefroren.

Zwischen beiden alternativen Beschreibungen ist ein drastischer Unterschied zu erkennen: Bei Benutzung der adiabatischen Basis (oben) genügen offenbar die berücksichtigten Zustände weitgehend zum Erreichen der Vollständigkeit. Die Kopplungsstärke verteilt sich zu etwa gleichen Teilen auf gebundene Zustände und Kontinuum. Für die fixierte ξ -Basis hingegen erreicht die Summe nur einen Bruchteil des exakten Werts. Tatsächlich fallen die Matrixelemente $\langle \varphi_{E_e}^{\xi} | \Delta H | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle$ erst bei sehr hohen Elektronenenergien langsam ab. Die schwächere Konvergenz als bei der $\partial/\partial R$ -Kopplung ist schon aus der Taylor-Entwicklung ersichtlich

$$\begin{aligned} \sum_k |\langle \varphi_k^{\xi} | \Delta H | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle|^2 &\approx (\Delta R)^2 \sum_k |\langle \varphi_k^{\xi} | \frac{\partial H}{\partial R} | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle|^2 \\ &\approx (\Delta R)^2 \sum_k (E_k - E_{1s})^2 |\langle \varphi_k^{\xi} | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_{1s}^{\xi} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (21)$$

Offenbar ist es also praktisch nicht möglich, die adiabatische Basis nach der fixierten Basis zu entwickeln, es sind dazu Beiträge von Zuständen mit sehr hohen Energien notwendig.

Die Konsequenz dieser Tatsache für die dynamischen Anregungen soll nun noch etwas detaillierter untersucht werden (siehe auch Ref. 86). Die "optimale" Basis soll dabei durch eine - nicht rigoros abgeleitete - Forderung nach Minimierung der Anregungsstärke bestimmt werden.

Als Variationsfunktion dient der Parameter $\xi(t)$, der das

Nach- oder Voreilen der Wellenfunktion bezüglich des wahren Zweizentrenabstands $R(t)$ bezeichnet. Das postulierte Variationsprinzip lautet

$$\delta \int dt \sum_k \left(\dot{R}^2 \left| \langle \varphi_k^s | R \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_{1s}^s \rangle \right|^2 + \left| \langle \varphi_k^s | \Delta H | \varphi_{1s}^s \rangle \right|^2 \right) \quad (23)$$

Hier wird also die Kopplungsstärke in höherliegende Zustände minimiert, Phasenfaktoren werden nicht berücksichtigt (§). Die resultierende Euler-Lagrange-Gleichung läßt sich unter Annahme kleiner Abweichungen $R(t) - S(t)$ mit Hilfe der Taylorentwicklung (21) in die Form bringen

$$\begin{aligned} (R - S)_{1s} &= \frac{\left(\ddot{R} + \frac{1}{2} \dot{R}^2 \frac{d}{dR} \right) \sum_k \left| \langle \varphi_k | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_{1s} \rangle \right|^2}{\left| \langle \varphi_k | \frac{\partial H}{\partial R} | \varphi_{1s} \rangle \right|^2} \\ &= \frac{\left(\ddot{R} + \frac{1}{2} \dot{R}^2 \frac{d}{dR} \right) \left| \langle \varphi_{1s} | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_{1s} \rangle \right|^2}{\langle \varphi_{1s} | \left(\frac{\partial H}{\partial R} \right)^2 | \varphi_{1s} \rangle - \left| \langle \varphi_{1s} | \frac{\partial H}{\partial R} | \varphi_{1s} \rangle \right|^2} \quad (24) \end{aligned}$$

Die Auswertung dieser Beziehung ⁸⁶⁾ führt bei Stoßgeschwindigkeiten unterhalb der Coulombbarriere auf sehr kleine Ab-

(§) Fußnote: Eine ähnliche Untersuchung (für leichte Stoßsysteme) wurde von D. Jakubassa angestellt ⁸⁷⁾. Sie optimiert einen Parameter λ , der die Aufteilung des Potentials von Target- und Projektilteilchen in zwei Anteile $V = (V_T + \lambda V_P) + (1 - \lambda)V_P$ beschreibt. Der erste Anteil bestimmt die Basiszustände, der zweite wirkt als Störpotential, $\lambda = 1$ liefert als Grenzfall die adiabatische Basis. Der Parameter λ ist hier zeitlich konstant und kann den wechselnden Grad von Adiabasie während des Stoßes nicht erfassen.

weichungen zwischen $R(t)$ und der "optimalen" Trajektorie $g(t)$. Für den $1s$ -Zustand bleibt $R - g$ kleiner als 1 fm , für die höheren Niveaus $2s, 3s$ wachsen die Werte auf 4 fm und 13 fm an. Dies weist darauf hin, daß die Verwendung der adiabatischen Basis am günstigsten ist. Das muß natürlich nicht heißen, daß die dynamischen Anregungen klein bleiben. Wir werden in Kap. IX sehen, daß Rechnungen in Störungstheorie nicht ausreichen, um die Locherzeugung quantitativ zu beschreiben.

V) Ein Modell für den überkritischen Zustand

1) Der Autoionisations-Formalismus

In diesem Abschnitt soll auf das Problem des stationären überkritischen Zustands eingegangen werden. Der benutzte Formalismus geht zurück auf U. Fano⁸⁸⁾ und wurde zur Beschreibung des atomaren Autoionisationsprozesses entwickelt. Wir folgen dabei der Darstellung von Rafelski, Müller und Greiner¹⁴⁾ und können uns daher hier besonders kurz fassen. In Ref. 16) und 89) findet man auch die Behandlung des Problems in zweiter Quantisierung.

Das Ziel ist, die Eigenlösungen Ψ_E im Kontinuum des Dirac-Hamiltonoperators H mit überkritischem Potential

$$(H - E) \Psi_E = 0 \quad (1)$$

zu konstruieren. Zu diesem Zweck wird eine Entwicklung

$$\Psi_E = a(E) \varphi + \int dE' b_{E'}(E) \psi_{E'} \quad (2)$$

nach Eigenfunktionen eines unterkritischen Hamiltonoperators H_0 angesetzt:

$$\begin{aligned} (H_0 - E_0) \varphi &= 0, \\ (H_0 - E) \Psi_E &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Hierbei wurde - um das Modell zu vereinfachen - angenommen, daß außer dem Kontinuum nur ein diskreter Zustand vorliegt (etwa der $1s$ -Zustand). Für exakte Rechnungen müßten auch

höhere gebundene Niveaus und das Elektronen-Kontinuum mit berücksichtigt werden. Das unterkritische H_0 kann dadurch konstruiert werden, daß man die Kernladung Z soweit verringert (oder im molekularen Fall den Zweizentrenabstand R soweit erhöht) bis der tiefste gebundene Zustand φ noch im Bereich des diskreten Spektrums liegt. Der Differenzoperator $\Delta H = H - H_0$ wird dann als Zusatzpotential behandelt, welches die Basiszustände φ und ψ_E vermischt.

Für dessen Matrixelemente schreiben wir

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \Delta H | \varphi \rangle &= \Delta E := E_{1s} - E_0, \\ \langle \psi_E | \Delta H | \varphi \rangle &= V_E, \\ \langle \psi_{E'} | \Delta H | \psi_E \rangle &\cong 0 \end{aligned} \quad (4)$$

d. h. das Rearrangement der Kontinuumszustände wird vernachlässigt. Durch Projektion auf die Basiszustände φ und ψ_E folgen aus (1) die gekoppelten Gleichungen

$$\begin{aligned} V_{E'} a(E) + (E' - E) b_{E'}(E) &= 0, \\ (E_{1s} - E) a(E) + \int dE' V_{E'}^* b_{E'}(E) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Weiterhin wird die Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{E'} | \Psi_E \rangle &= a^*(E') a(E) + \int dE'' b_{E''}^*(E') b_{E''}(E) \\ &= \delta(E' - E) \end{aligned} \quad (6)$$

Durch die oben genannten Näherungen hat sich das Gleichungssystem so vereinfacht, daß es exakt gelöst werden kann. Das

Resultat ist ¹³⁾

$$a(E) = \frac{V_E^*}{E - E_{1s} - \int dE' \frac{|V_{E'}|^2}{E - E' + i\varepsilon}}, \quad (7)$$

$$b_{E'}(E) = a(E) \frac{V_{E'}}{E - E' + i\varepsilon} + \delta(E - E') \quad (8)$$

Die Amplitude $a(E)$, welche die Beimischung des "Resonanzanteils" φ zur Kontinuumswellenfunktion Ψ_E bestimmt, hat also einen komplexen Pol bei

$$\begin{aligned} E_r &= E_{1s} + \int dE' \frac{V_{E'}}{E_r - E' + i\varepsilon} \\ &= E_{1s} + P \int dE' \frac{V_{E'}}{E_r - E'} - i\pi |V_{E_r}|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Die Lage der Resonanz weist gegenüber dem Diagonalterm $\langle \varphi | H | \varphi \rangle = E_{1s}$ eine Niveauverschiebung auf (gegeben durch das Hauptwertintegral) und hat einen negativen Imaginärteil gleich der halben Zerfallsbreite

$$\Gamma = 2\pi |V_{E_r}|^2 \quad (10)$$

2) Spontane Positronenerzeugung im Autoionisationsmodell

Wir wollen nun durch eine explizite Rechnung untersuchen, welche Konsequenzen das "Eintauchen" eines gebundenen Zustands auf die Emission von Positronen hat. Dazu benutzen wir ein einfaches Modell für die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators:



Zur Zeit $t = 0$ springt das Potential von seiner ursprünglichen unterkritischen Stärke V_0 auf den überkritischen Wert V . Zur Zeit $t = T$ nimmt es wieder seinen alten Wert V_0 an. Wir beschränken unsere Basis auf einen gebundenen Zustand und das Positronen-Kontinuum und können die Lösungen aus dem vorigen Abschnitt verwenden.

Zur Zeit $t = 0$ sei das System so präpariert, daß $\Psi(0) = \varphi$ (entsprechend einem Loch in der K-Schale). Für $t > 0$ entwickeln sich die Wellenfunktionen Ψ_E frei, d. h.

$$\Psi(t) = \int dE \tilde{c}_E \Psi_E e^{-iEt} \quad (11)$$

mit konstanten Entwicklungskoeffizienten $\tilde{c}_E$ erfüllt die zeitabhängige Diracgleichung $(H - i\partial/\partial t) \Psi(t) = 0$. Gl. (11) erfüllt die Stetigkeitsforderung der Wellenfunktion bei $t = 0$ wenn

$$\tilde{c}_E = \langle \Psi_E | \Psi(0) \rangle = a^*(E). \quad (12)$$

Es soll die Wellenfunktion bei $t = T$ bestimmt werden. Dazu setzt man an

$$\Psi(T) = c_0 e^{-iE_0 T} + \int dE c_E(T) e^{-iET} \Psi_E \quad (13)$$

und fordert Stetigkeit bei $t = T$. Projektion von (11) und (13) auf φ und Ψ_E liefert die Gleichungen

$$c_0(T) = e^{iE_0 T} \int dE \tilde{c}_E a(E) e^{-iET} \quad (14)$$

und

$$c_E(T) = e^{iET} \int dE' \tilde{c}_{E'} b_E(E') e^{-iE'T}. \quad (15)$$

Gl. (14) läßt sich mit (7) leicht integrieren

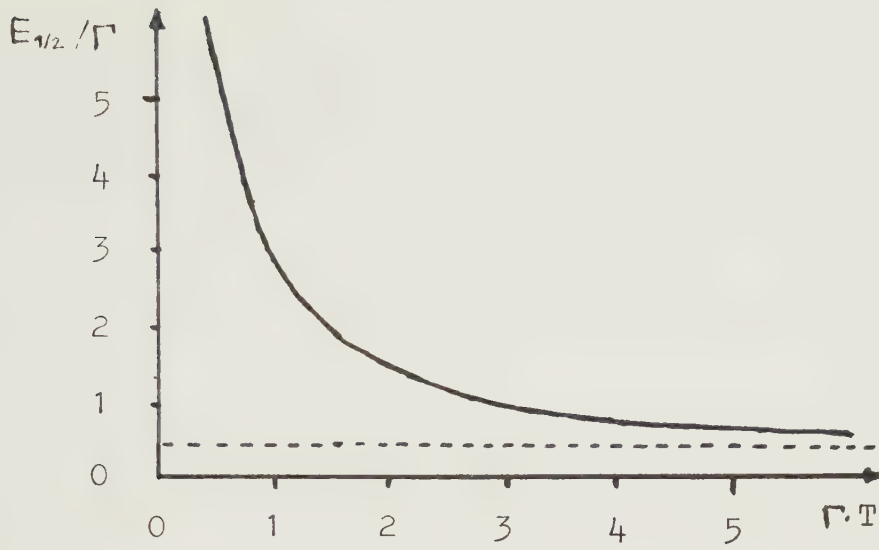
$$c_0(T) = e^{i(E_0 - E_r)T} e^{-\Gamma T/2} \quad (16)$$

Die Lochwahrscheinlichkeit fällt also exponentiell ab mit der Zeit T , die das Niveau im Kontinuum verbringt. Das Spektrum der emittierten Teilchen folgt aus Gl (15). Durch Residuenintegration erhält man

$$\begin{aligned} c_E(T) &= e^{iET} \left[\int dE' |a(E')|^2 \frac{V_E}{E' - E + i\epsilon} e^{-iE'T} + a^*(E) e^{-iET} \right] \\ &= e^{i(E - E_r)T} e^{-\Gamma T/2} \frac{V_E}{E - E_r + i\Gamma/2} - 2\pi i |a(E)|^2 V_E \\ &\quad + \frac{V_E}{E - E_r - i\Gamma/2} \\ &= \frac{V_E}{E - E_r + i\Gamma/2} (1 - e^{i(E - E_r)T} e^{-\Gamma T/2}) \quad (17) \end{aligned}$$

Im Grenzfall $\Gamma T \gg 1$ bleibt also die volle Lochwahrscheinlichkeit im Kontinuum und liefert ein Emissionsspektrum mit der natürlichen Linienbreite Γ . Für kleinere Zeiten T sinkt die Emissionswahrscheinlichkeit und gleichzeitig wird das Spektrum verbreitert.

Die Halbwertsbreite läßt sich aus der transzendenten Gleichung $|c_{E_r + E_{1/2}}(T)|^2 = \frac{1}{2} |c_{E_r}(T)|^2$ bestimmen. Die Skizze zeigt die Abhängigkeit von $E_{1/2}$ als Funktion der "Eintauchzeit" T , beide in Einheiten der Zerfallsbreite Γ ausgedrückt. Das Ergebnis spiegelt die Unschärferelation wieder.



Halbwertsbreite der Linie im Positronenspektrum
als Funktion der "Eintauchzeit" .

VI) Dynamische Behandlung überkritischer Stöße

1) Problemstellung

Im bisher beschriebenen Formalismus wurde nur darauf eingegangen, wie Stöße zu behandeln sind, in denen alle gebundenen Zustände Energien zwischen $+mc^2$ und $-mc^2$ haben. In überkritischen Stößen, d. h. $Z_1 + Z_2 = Z > Z_{cr}$ und $R < R_{cr}$ erreicht der tiefste gebundene Zustand das untere Kontinuum und wird zur Resonanz.

Die im statischen Falle damit verbundene Möglichkeit der spontanen Positronenemission haben wir in Kap. V schon diskutiert. Andererseits wird sich herausstellen, daß die Zeitabhängigkeit des Stoßes eine große Rolle spielt und daß induzierte Übergänge aufgrund der Kernbewegung sehr wichtig sind. Wir benötigen also einen Formalismus, der geeignet ist, gleichzeitig die induzierten Anregungen und die Resonanzeigenschaften des "eingetauchten" Zustands zu beschreiben.

Die gekoppelten Differentialgleichungen (II.12) sind dazu nicht ohne weiteres geeignet: Im überkritischen Bereich verschwindet der $1s\sigma$ -Zustand aus dem diskreten Spektrum und damit auch die zugehörige Amplitude. Innerhalb des unteren Kontinuums treten dafür scharfe, nahezu singuläre Matrixelemente der $\partial/\partial R$ -Kopplung auf, die sich in praktischen Rechnungen nicht handhaben lassen.

Wir werden in den folgenden Abschnitten kurz auf verschiedene Beschreibungsmöglichkeiten der Resonanz eingehen, die alle mit Nachteilen behaftet sind. Im nächsten Kapitel wer-

den wir dann ein besser geeignetes Verfahren beschreiben und anschließend numerische Ergebnisse zur Positronenerzeugung diskutieren. Dieses Projektionsverfahren hat auch den konzeptuellen Vorteil einer zumindest prinzipiellen Unterscheidung zwischen "spontanen" und "induzierten" Übergängen, die beide durch verschiedenartige Kopplungsterme vermittelt werden.

2) Statische Näherung

Die einfachste Möglichkeit der Beschreibung des Zerfalls einer Resonanz mit zeitabhängiger Energie und Breite ist die statische Näherung. Man nimmt hierbei an, daß zu jedem Zeitpunkt ein ungestörter Zerfall mit der Übergangsrate $\frac{dP}{dt} \sim \Gamma(t)$ stattfindet. Die Zeitabhängigkeit wird dabei parametrisch durch die Kernbewegung bestimmt. Die gesamte Erzeugungsrate folgt dann durch Integration über die Bahn $R(t)$ im überkritischen Bereich $-t_{cr} < t < t_{cr}$, definiert durch $E_{1s}(R(\pm t_{cr})) = -mc^2$. Die Wahrscheinlichkeit für Positronenerzeugung in einer Kollision mit Stoßparameter b ist also (Peitz et al., 1973²⁴⁾) :

$$P(b) = \int_{-\infty}^{-mc^2} dE_p \int_{-t_{cr}}^{t_{cr}} dt \frac{dP}{dE_p dt}(b) L_0(b) \quad (1)$$

mit

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dE_p dt} &= \Gamma(R(t)) \left| a(E_p, R) \right|^2 \\ &= \Gamma(R) \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma(R)}{(E_p - E_{res})^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2(R)} \end{aligned} \quad (2)$$

wobei für das Spektrum der erzeugten Positronen eine Breit-Wigner-Verteilung (Gl. V.7) angesetzt wurde. L_0 ist die Wahrscheinlichkeit für die Anwesenheit eines Loches. Das Modell läßt sich noch etwas verbessern, wenn man die Auffüllung des Resonanzzustandes mit einem Exponentialfaktor $e^{-\int_0^t \Gamma(t') dt'}$ berücksichtigt. Ein ähnliches Verfahren liegt einer größeren Anzahl von Arbeiten von Popov und Mitarbeitern zugrunde³³⁾.

Die statische Näherung ist jedoch zur Beschreibung der Positronenerzeugung im Schwerionenstoß unzureichend. Sie erlaubt weder die Möglichkeit dynamisch induzierter Anregungen, noch die Interferenz zwischen zu verschiedenen Zeitpunkten erfolgten Übergängen. (Letzteres ließe sich durch Verwendung einer stationary-phase-approximation verbessern). Erzeugung und Zerfall von Löchern werden inkohärent, nur durch Multiplikation von Wahrscheinlichkeiten behandelt. Solch ein Vorgehen ist nur im Grenzfall langsamer Kernbewegung zulässig, wenn alle in der exakten Behandlung auftretenden Phasenfaktoren $e^{i \int_0^t dt' \Delta E(t')}$ so schnell oszillieren, daß die Kohärenz zerstört wird.

Beim Schwerionenstoß ist die Kinematik jedoch durch die Coulombabstoßung der Kerne festgelegt. Um zu kleinen internuklearen Abständen $2a$ von der Größenordnung R_{cr} vorzudringen muß man wegen $E = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2a} = \frac{1}{2} \mu v^2$ mit Geschwindigkeiten um $v/c \approx .1$ einschießen. Die Stoßzeit Δt (etwa definiert als die Zeit, während der sich die Kerne in einem Abstand kleiner als R befinden) ist entsprechend kurz. Aus Gl.(VIII.1) kann man entnehmen

$$\Delta t(R) = 2 \frac{a}{v} \left(\sqrt{\left(\frac{R}{a} - 1\right)^2 - \epsilon^2} + \ln \left(\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{R}{a} - 1\right) + \sqrt{\frac{1}{\epsilon^2} \left(\frac{R}{a} - 1\right)^2 - 1} \right) \right) \quad (3)$$

Tabelle II : Stoßzeit Δt [10^{-21} sec]
Breite ΔE [keV]

R [fm]	2a = 16 fm		2a = 20 fm		2a = 25 fm	
	Δt	ΔE	Δt	ΔE	Δt	ΔE
35	2.3	1770	2.5	1690	2.4	1730
100	6.6	620	7.5	550	8.5	490
300	18.5	220	21.	200	23.8	170

Einige typische Werte $\Delta t(R)$ sind für U-U-Stöße nahe der Coulombbarriere in der Tabelle zusammengestellt. Die zugehörige Energiebreite $\Delta E = \frac{2\pi\hbar}{\Delta t}$ ist also durchaus nicht vernachlässigbar gegen die Übergangsenergien und auf jeden Fall viel größer als die spontane Zerfallsbreite der Resonanz. Daß die statische Näherung die Unschärferelation verletzt ist schon daraus ersichtlich, daß sie in der Umgebung von $E_p = E_{\text{res}}(R_{\text{min}})$ eine scharfe Spitze im Positronenspektrum vorhersagt.

3) Diskretisierung des Kontinuums

Bei Verwendung der adiabatischen Basis wird im überkritischen Bereich die gebundene Wellenfunktion über das untere Kontinuum verteilt. Wie schon in Abschnitt VI.1, führt dies zu Kopplungen $\langle \psi_f | \partial / \partial t | \psi_i \rangle$ mit sehr scharfen Strukturen in der Umgebung der Resonanzenergie. Aus der Fano'schen Ent-

wicklung (V.2) ersieht man, daß die Kontinuumswellenfunktion hier einen starken lokalisierten Anteil enthält.

Beschränkt man sich in praktischen Rechnungen auf eine endliche Anzahl von Kontinuumszuständen, so kann man nicht hoffen, zu sinnvollen Resultaten zu gelangen, da die Resonanzenergie nur gelegentlich und zufällig mit einer der Stützstellen übereinstimmen wird. Diese Schwierigkeit ließe sich durch Diskretisierung des Kontinuums umgehen. Zu diesem Zweck kann man das System in ein (genügend großes) Volumen setzen, auf dessen Oberfläche man eine Randbedingung an die Wellenfunktion stellt.^(§) Im Kontinuum hat man dann eine endliche Dichte von Zuständen pro Energieintervall. Aus der Bedingung

$$\frac{\Delta p}{\hbar} R + \frac{d\delta(E)}{dE} \Delta E = 2\pi \quad (4)$$

folgt unter Vernachlässigung der Ableitungen der Streuphase $\delta(E)$ als Abschätzung für den Abstand zwischen den diskretisierten Zuständen

$$\Delta E = \frac{pc}{E} \frac{2\pi\hbar c}{R} \quad (5)$$

Das Energiespektrum als Funktion der Stoßzeit hat den in Abb. 10 schematisch angedeuteten Verlauf. Im Eintauchbereich - $t_{cr} < t < t_{cr}$ kommt die Resonanz als zusätzlicher (N+1)ter Zustand zum Kontinuum hinzu. Solange ΔE nicht klein gegen die Zerfallsbreite Γ gewählt ist, steckt die Resonanz im we-

(§) Fußnote: Die in der Schrödingertheorie gern verwendete unendlich hohe Potentialwand, verbunden mit dem Verschwinden der Wellenfunktion, ist wegen des Klein'schen Paradoxons in der relativistischen Theorie nicht sinnvoll.

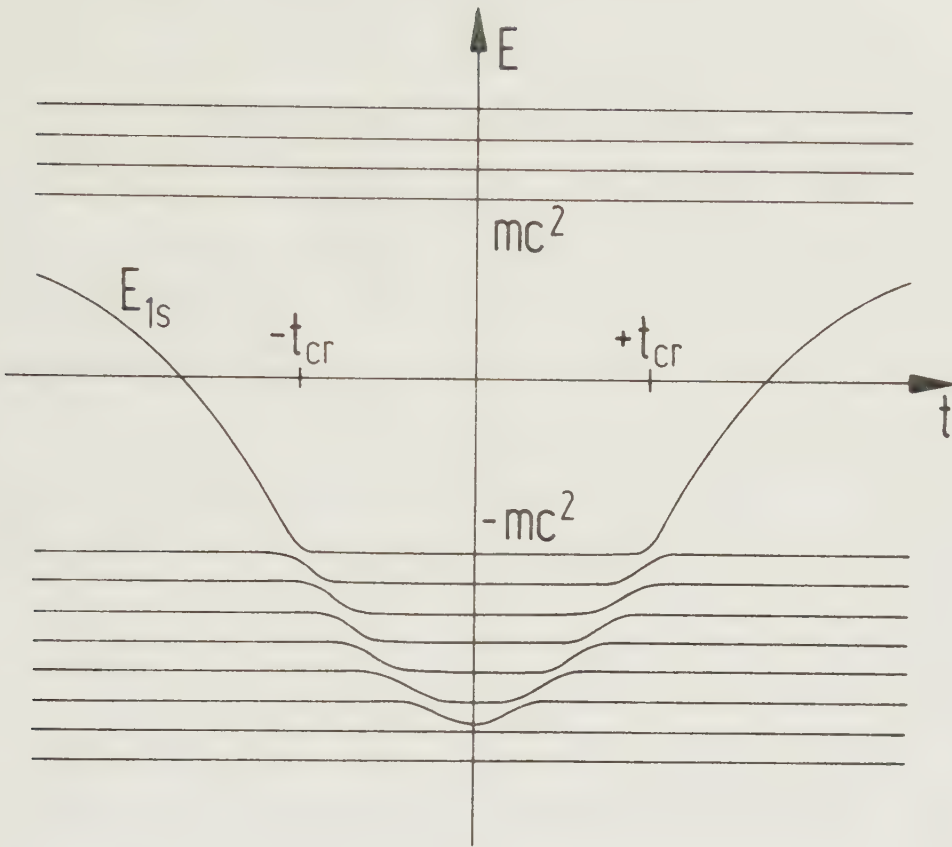


Abb. 10: Schematische Darstellung des Verlaufs des $1s$ -Zustands im unteren Kontinuum bei Diskretisierung des Lösungsspektrums.

sentlichen immer in einem einzigen Niveau. An einer Reihe von vermiedenen Kreuzungspunkten springt sie jedoch jeweils von einem Basiszustand zum benachbarten. Dies führt zu großen und (als Funktion von t) stark variierenden Kopplungsmatrixelementen an den vermiedenen Kreuzungsstellen. In jedem Stoß mit endlicher, nicht verschwindender Geschwindigkeit wird das $1s$ -Elektron (oder -Loch) der "diabatischen" Wellenfunktion über die Sprungstellen hinweg folgen. Daraus ist schon ersichtlich, daß die diskretisierte adiabatische Basis für numerische Rechnungen denkbar ungünstig ist. Es kommt schließlich darauf an, den sehr kleinen (ca. 10^{-3}) Anteil der eingebrachten Löcher zu berechnen, der beim Auseinanderlaufen der Kerne nicht wieder in den $1s$ -Zustand geht, sondern als Positron im Kontinuum verbleibt.

4) Verwendung der unterkritischen Basis

Die Schwierigkeiten bei der dynamischen Beschreibung der Resonanz ließen sich umgehen durch Verwendung einer Entwicklungsbasis, in der der $1s$ -Zustand immer unterkritisch bleibt. Dies kann man leicht erreichen, indem man das Potential begrenzt, etwa durch Beschränkung auf Zweizentrenabstände $R \geq R_0$ mit $R_0 \geq R_{cr}$ bei der Berechnung der Basiswellenfunktionen. Nähern sich die stoßenden Kerne auf Distanzen $R(t) < R_0$, so werden Potentialkopplungen $\langle \varphi_f | H(R(t)) - H(R_0) | \varphi_i \rangle$ wirksam. Die zeitabhängige Wellenfunktion lautet also in Abänderung von Gl. (II.10) :

$$\begin{aligned}\Phi_i(t) = & \sum_k a_{ik}(t) \varphi_k(t) e^{-i\chi_k(t)} \Theta(-t_0 - t) \\ & + \sum_k a_{ik}(t) \varphi_k^0 e^{-i\chi_k(t)} \Theta(t + t_0) \Theta(t_0 - t) \\ & + \sum_k a_{ik}(t) \varphi_k(t) e^{-i\chi_k(t)} \Theta(t - t_0)\end{aligned}\quad (6)$$

mit $\varphi_k^0 := \varphi_k(R(t_0))$. Bei der Berechnung der Phasen χ_k wird jeweils der Erwartungswert von $H(R(t))$ im k -ten Basiszustand als Energiewert verwendet.

Die Entwicklungskoeffizienten gehorchen dann dem Differentialgleichungssystem

$$\dot{a}_{ij}(t) = - \sum_{k \neq j} a_{ik}(t) \left\{ \begin{array}{l} \langle \varphi_j | \partial / \partial t | \varphi_k \rangle \\ i \langle \varphi_j^0 | H(R(t)) - H(R_0) | \varphi_k^0 \rangle \end{array} \right\} e^{-i(\chi_k - \chi_j)} \quad (7)$$

wo die obere Zeile für $R < R_0$ und die untere für $R \geq R_0$ gilt. Randterme durch Differentiation der Sprungfunktion treten nicht auf, da Φ_i stetig konstruiert wurde.

Diese Beschreibung ist leider für praktische Rechnungen schlecht geeignet. Der Grund dafür wurde schon in Abschnitt IV.4 diskutiert: Die Matrixelemente der Potentialkopplung $\langle \varphi_f^0 | H(R) - H(R_0) | \varphi_i^0 \rangle$ fallen mit wachsender Entfernung zwischen den Niveaus i und f nur sehr langsam ab. Bei der Entwicklung der zeitabhängigen Wellenfunktion müßten daher unpraktikabel viele Zustände, insbesondere energetisch sehr hochliegende Kontinuumszustände, berücksichtigt werden. Geschicht dies nicht, so sind auch numerische Lösungen der gekoppelten-Kanal-Gleichungen nicht erfolgreich.

Die schlechte Konvergenz der gewählten Entwicklung deutet

sich schon in der störungstheoretischen Berechnung der Bindungsenergie $E_{1s}(R)$ an. Die Näherung erster Ordnung $E_{1s}(R) \cong E_{1s}(R_0) + \langle \varphi_{1s}^0 | H(R) - H(R_0) | \varphi_{1s}^0 \rangle$ verläuft bei kleinen Abständen flach, während die echte Resonanzenergie $E_{1s}(R)$ steil eintaucht, vgl. Fig. 5. Wegen der schlechten Konvergenz ist es kaum möglich, die Korrektur zweiter Ordnung $\Delta E^{(2)} =$

$$\sum_n \frac{|\langle \varphi_n^0 | \Delta H | \varphi_{1s}^0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \quad \text{numerisch zu berechnen.}$$

Das Verfahren läßt sich einfach testen, indem man es auf unterkritische Stöße anwendet, dabei einen willkürlichen Wert für R_0 ansetzend. Untersuchungen im Pb-Pb-System ergaben wesentlich kleinere Loch- und Positronenwahrscheinlichkeiten im Vergleich zu Rechnungen mit der adiabatischen Basis. Bei der Konstruktion eines Formalismus zur Beschreibung der überkritischen Stöße werden wir besonders darauf achten, daß der Grenzfall $Z \leq Z_{cr}$ wieder auf die alten Lösungen führt.

VII) Ein Projektionsverfahren für die überkritische Basis

1) Die Grundidee

Die im vorigen Kapitel diskutierten Methoden zur Beschreibung des eingetauchten $1s\sigma$ - Zustands in überkritischen Schwerionenstößen haben sich als ungünstig erwiesen. Um zu einem besser geeigneten Verfahren zu gelangen, sollte man sich das Verhalten der Wellenfunktion beim Übergang in den Bereich $R < R_{cr}$ klarmachen. Wird der Kernabstand unter den kritischen Wert R_{cr} verkleinert, so ändert sich an der Gestalt der Ladungsverteilung des $1s\sigma$ - Zustands nur wenig. Sie besitzt weiterhin ein Maximum bei ca. 20 fm und fällt dann nach außen ab.

Allerdings ist nun ein Tunnelprozess durch den "gap" zwischen $E - V(r_-) - mc^2$ und $E - V(r_+) + mc^2$ möglich und bei größerer Entfernung von den Kernen oszillieren die Wellenfunktionen, die in der Nähe der Resonanz liegen. Bei den experimentell erreichbaren Werten von R und Z bleibt die Breite Γ jedoch klein. Der $1s\sigma$ - Zustand behält daher im wesentlichen seine Identität, abgesehen vom Auftreten einer kleinen Spreizungsbreite. Für viele Zwecke, etwa die radiale Kopplung an höherliegende Zustände, wird sich das Verhalten aus dem unterkritischen Bereich stetig nach $R < R_{cr}$ fortsetzen lassen, wenn man eine geeignete gebundene Wellenfunktion im Resonanzbereich ϕ_R definiert. Diese stetige Fortsetzung war uns ja in VI.4 als Resultat der Untersuchungen zur Wahl einer fixierten Basis als besonders wichtig erschienen.

Abgesehen von der Definition eines "quasi"- $1s\bar{6}$ - Zustands verbleibt das Problem, das Kontinuum φ_{E_p} so zu modifizieren, daß es orthogonal zu ϕ_R wird und vollständig bleibt. Dies wird mit Hilfe eines aus der Kernphysik entlehnten Projektionsverfahrens^{90),91)} im nächsten Abschnitt durchgeführt. Der damit erhaltene Satz von stationären Wellenfunktionen soll dann als Basis für die Entwicklung der zeitabhängigen Wellenfunktion dienen.

2) Konstruktion der Projektionsbasis

Wir gehen zunächst davon aus, daß wir eine "physikalisch vernünftige" Wellenfunktion $|\phi_R\rangle$ zur Beschreibung des gebundenen Anteils des Resonanzzustands konstruiert haben. Diese sollte normiert

$$\langle \phi_R | \phi_R \rangle = 1 \quad (1)$$

und orthogonal zu den Zuständen $|\psi_a\rangle$ außerhalb des Positronenkontinuums sein

$$\langle \psi_a | \phi_R \rangle \cong 0 \quad (2)$$

wobei $|\psi_a\rangle$ alle gebundenen Zustände $|\psi_n\rangle$ und das obere Kontinuum $|\varphi_{E_e}\rangle$ umfaßt. Die letzte Forderung wird sich als eine entscheidende Näherung in dem zu entwickelnden Formalismus herausstellen. Das Ziel ist nun, die Resonanz aus dem Kontinuum $|\varphi_{E_p}\rangle$ zu extrahieren und ein modifiziertes Kontinuum $|\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle$ zu gewinnen, welches zur Resonanz orthogonal

ist

$$\langle \tilde{\varphi}_{E_p} | \phi_R \rangle = 0$$

und weiterhin den gleichen Teilraum aufspannt.

In der Kernphysik wurde dieses Problem, zuerst von Wang und Shakin⁹⁰⁾, mittels einer Projektionsoperator-Technik gelöst. Im Rahmen des Kontinuum-Schalenmodells wurden resonante Analogzustände⁹²⁾ und Einteilchenresonanzen^{90), 93)-95)} behandelt. Das Verfahren stützt sich auf die von Feshbach^{96), 97)} eingeführten Projektionsoperatoren P und Q , durch welche "offene" und "geschlossene" Kanäle definiert werden. Wir haben zunächst den Operator für den Raum der Positronenzustände

$$P_0 = \int dE_p |\varphi_{E_p}\rangle \langle \varphi_{E_p}| \quad (4)$$

und sein Komplement

$$\begin{aligned} Q_0 &= \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| + \int dE_e |\varphi_{E_e}\rangle \langle \varphi_{E_e}| \\ &= \sum \varphi_\alpha \langle \varphi_\alpha|. \end{aligned} \quad (5)$$

Die $|\varphi_{E_p}\rangle$ und $|\varphi_\alpha\rangle$ sind dabei Eigenzustände des Hamiltonoperators

$$(E_p - H) |\varphi_{E_p}\rangle = 0 \quad \text{und} \quad (E_\alpha - H) |\varphi_\alpha\rangle = 0. \quad (6)$$

Es gelten die Projektor-Eigenschaften

$$P_0^2 = P_0, \quad Q_0^2 = Q_0, \quad P_0 Q_0 = 0, \quad P_0 + Q_0 = 1. \quad (7)$$

Der Raum P_0 enthält noch den "eingetauchten" Resonanzzu-

stand. Der Anteil der gebundenen $1s5$ -Wellenfunktion soll nun in Gestalt der Wellenfunktion ϕ_R in den Q -Raum gebracht werden. Dazu werden neue Projektionsoperatoren definiert:

$$Q = \sum |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| + |\phi_R\rangle\langle\phi_R| \quad (8)$$

$$P = 1 - Q := \int dE_p |\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle\langle\tilde{\varphi}_{E_p}| \quad (9)$$



Die beiden möglichen Zerlegungen des Zustandsraums sind in der Skizze dargestellt.

Unter der Voraussetzung (2) erfüllen (8) und (9) wiederum die Projektorbeziehungen

$$P^2 = P, \quad Q^2 = Q, \quad PQ = 0, \quad P + Q = 1. \quad (10)$$

Wenn $|\phi_R\rangle$ günstig gewählt war wird das neue Kontinuum $|\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle$ keine Resonanzeigenschaften, erkennbar etwa am Verhalten der Streuphase, mehr zeigen.

Die $|\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle$ sind Eigenzustände des auf den Teilraum P projizierten Hamiltonoperators

$$(E_p - PHP) |\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle = 0. \quad (11)$$

Unter Benutzung von (2), (6), (8), (9) läßt sich (11) um-

formen

$$\begin{aligned} (E_p - H) |\tilde{\psi}_{E_p}\rangle &= - Q H |\tilde{\psi}_{E_p}\rangle \\ &= - \left(\sum |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| E_\alpha + |\phi_R\rangle \langle \phi_R| H \right) |\tilde{\psi}_{E_p}\rangle \end{aligned}$$

also⁹⁰⁾

$$(E_p - H) |\tilde{\psi}_{E_p}\rangle = - \langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle |\phi_R\rangle \quad (12)$$

Das modifizierte Kontinuum erfüllt also die ursprüngliche Diracgleichung mit einem zusätzlichen inhomogenen Term, der zur Resonanzwellenfunktion $|\phi_R\rangle$ proportional ist.

Die Lösung von (12) kann mit Hilfe der Green'schen Funktion oder durch direkte Integration erfolgen. Betrachten wir zunächst die formale Lösung mittels

$$(E - H) G = 1 \quad (13)$$

Die allgemeine Lösung von (12) lautet

$$|\tilde{\psi}_{E_p}\rangle = C |\varphi_{E_p}\rangle - \langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle G |\phi_R\rangle$$

wobei der erste Term die Lösung der homogenen Gleichung enthält. Da das inhomogene Glied separabel ist, läßt sich die Gleichung analytisch auflösen. Projektion auf ϕ_R liefert wegen der Orthogonalität (3)

$$0 = C \langle \phi_R | \varphi_{E_p} \rangle - \langle \phi_R | G | \phi_R \rangle \langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$$

und damit

$$|\tilde{\psi}_{E_p}\rangle = C \left(1 - \frac{G |\phi_R\rangle \langle \phi_R|}{\langle \phi_R | G | \phi_R \rangle} \right) |\varphi_{E_p}\rangle \quad (14)$$

Mit Hilfe der Eigenschaften des Propagators läßt sich zei-

gen, daß das so definierte Kontinuum bei geeigneter Wahl der Konstanten C auf der Energieskala normierbar ist, also

$$\langle \tilde{\varphi}_{E_p'} | \tilde{\varphi}_{E_p} \rangle = \delta(E_p' - E_p) . \quad (15)$$

Weiterhin gilt auch

$$\langle \tilde{\varphi}_{E_p'} | H | \tilde{\varphi}_{E_p} \rangle = E_p \delta(E_p' - E_p) . \quad (16)$$

Wird der Propagator G^+ für auslaufende Wellen verwandt, so ist einfach $|C|^2 = 1$.

Man kann nun zeigen⁹⁰⁾ (siehe auch Ref. 91), daß die Streuphase der neuen Kontinuumswellen $\tilde{\delta} = \delta + \delta'$ um eine Gegenphase δ' verschoben ist. Ihr Betrag folgt aus der Gleichung

$$e^{-2i\delta'(E)} = \frac{E - E_R + \Delta(E) - i\pi |\gamma(E)|^2}{E - E_R + \Delta(E) + i\pi |\gamma(E)|^2} \quad (17)$$

mit der Resonanzenergie

$$E_R = \langle \phi_R | H | \phi_R \rangle , \quad (18)$$

der Energieverschiebung

$$\Delta(E) = P \int dE' \frac{|\gamma(E')|^2}{E - E'}$$

und dem Zerfallsmatrixelement

$$\gamma(E) = \langle \phi_R | H | \varphi_E \rangle . \quad (19)$$

Gl. (17) läßt sich auch schreiben als

$$\tan \delta' = - \frac{\Gamma/2}{E - E_R - \Delta} \quad (20)$$

mit der Zerfallsbreite

$$\Gamma(E) = 2\pi |\gamma(E)|^2. \quad (21)$$

Die Gegenphase zeigt also genau das Verhalten einer Breit-Wigner-Resonanz (vgl. etwa Ref. 98). Bei geeigneter Wahl von $|\phi_R\rangle$ kann dadurch erreicht werden, daß das Resonanzverhalten von $|\varphi_{E_p}\rangle$ kompensiert wird und somit $\tilde{\delta}$ als Funktion der Energie völlig glatt verläuft.

Wenn man die Ortsdarstellung der Green'schen Funktion verwendet und die entsprechenden Integrationen ausführt, kann man die formale Lösung (14) zur Berechnung der Wellenfunktionen $|\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle$ verwenden. Die Green'sche Funktion für das Monopol-Coulombpotential läßt sich durch Kombination der regulären und irregulären Lösung der Diracgleichung ausdrücken und ist z. B. in Ref. 99) angegeben.

Einfacher ist es jedoch, (12) direkt zu lösen. Es handelt sich um eine Integrodifferentialgleichung vom Fredholm'schen Typ mit einem ausgeartetem (= separablen) Kern¹⁰⁰⁾, nämlich $|\phi_R\rangle\langle\phi_R| H$. Diese spezielle Struktur ermöglicht es, mit einem einfachen Verfahren⁹⁰⁾ die Lösung zu finden:

- (1) Es werden zwei beliebige reelle Konstanten $\gamma^{(i)}$ vorgegeben.
- (2) Mit diesen Werten wird die inhomogene Diracgleichung (12) numerisch gelöst^(§):

$$(H - E) |\varphi_E^{(i)}\rangle = \gamma^{(i)} |\phi_R\rangle$$

(§) Fußnote: Es ist naheliegend, den speziellen Wert $\gamma^{(1)} = 0$ zu verwenden, sodaß $|\varphi_E^{(1)}\rangle = |\varphi_E\rangle$ die ursprüngliche homogene Kontinuumslösung wird.

(3) Die Lösung wird als Linearkombination der $\varphi_E^{(i)}$ angesetzt:

$$|\tilde{\varphi}_E\rangle = a |\varphi_E^{(1)}\rangle + b |\varphi_E^{(2)}\rangle .$$

(4) Durch die Orthogonalitätsforderung $\langle\phi_R|\tilde{\varphi}_E\rangle = 0$ wird das Verhältnis der Koeffizienten festgelegt:

$$|\tilde{\varphi}_E\rangle = a (|\varphi_E^{(1)}\rangle - \frac{\langle\phi_R|\varphi_E^{(1)}\rangle}{\langle\phi_R|\varphi_E^{(2)}\rangle} |\varphi_E^{(2)}\rangle) . \quad (22)$$

(5) Die Wellenfunktion wird asymptotisch ($r \rightarrow \infty$) durch Festlegung ihrer Amplitude normiert (vgl. IV.14) .

Für das Kopplungsmatrixelement zwischen Resonanzzustand und Kontinuum folgt

$$\langle\phi_R|H|\tilde{\varphi}_E\rangle = a (\gamma^{(1)} - \frac{\langle\phi_R|\varphi_E^{(1)}\rangle}{\langle\phi_R|\varphi_E^{(2)}\rangle} \gamma^{(2)}) . \quad (23)$$

Durch Berechnung der linken Seite von (12) und Vergleich mit (23) überzeugt man sich leicht von der Konsistenz der gefundenen Lösung.

Das beschriebene Projektionsverfahren läßt sich ohne Mühe auch auf den Fall ausdehnen, daß mehrere (N) Resonanzen aus dem Kontinuum entfernt werden müssen⁹¹⁾. Man geht dann von einem Satz $|\phi_i\rangle$ von Resonanzwellenfunktionen (deren Wahl natürlich schwierig sein kann) aus, die den Bedingungen

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} , \quad \langle\phi_i|\tilde{\varphi}_E\rangle = 0 \quad (24)$$

genügen sollen und benutzt die Projektionsoperatoren

$$Q = Q_0 + Q_1 = \sum |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| + |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (25)$$

$$P = 1 - Q .$$

Analog zur Herleitung von Gl (12) erhält man dann die Dirac-Gleichung

$$(E - H) |\tilde{\psi}_E\rangle = - \sum_{i=1}^N |\phi_i\rangle \langle \phi_i | H | \tilde{\psi}_E \rangle \quad (26)$$

Wie man sieht bleibt der Integralkern separabel, nun vom Grade N . Die formale Lösung mittels Green'scher Funktion lautet jetzt

$$|\tilde{\psi}_E\rangle = C \left(1 - G \frac{Q_1}{Q_1 G Q_1} \right) |\varphi_E\rangle \quad (27)$$

wobei Q_1 durch Gl. (25) definiert ist. Das Ergebnis kann man schreiben als

$$|\tilde{\psi}_E\rangle = C \left(1 - G \sum_{i,j} |\phi_i\rangle (\langle \phi_k | G | \phi_l \rangle)^{-1}_{ij} \langle \phi_j | \right) |\varphi_E\rangle \quad (28)$$

wobei die Matrix $\langle \phi_k | G | \phi_l \rangle$ zu invertieren ist.

Auch die Integrationsmethode, die zu Gl. (22) führte, kann auf den Fall mehrerer Resonanzen ausgedehnt werden¹⁰¹⁾. Um genügend Bestimmungsgleichungen zu erhalten setzen wir nun

$\gamma^{(1)} = 0$, was ohne Beschränkung der Allgemeinheit möglich ist, und lösen für alle $i = 1, \dots, N$ die inhomogene Gleichung

$$(H - E) |\varphi_{E,i}^{(2)}\rangle = \gamma^{(2)} |\phi_i\rangle \quad (29)$$

$\gamma^{(2)}$ ist weiterhin eine frei wählbare Konstante. Die Lösung wird wieder als Linearkombination angesetzt

$$|\tilde{\psi}_E\rangle = a |\varphi_E\rangle + \sum_{i=1}^N b_i |\varphi_{E,i}^{(2)}\rangle \quad (30)$$

und die b_i durch Orthogonalisierung auf $\langle \phi_j |$ bestimmt:

$$0 = \langle \phi_j | \tilde{\psi}_E \rangle = a \langle \phi_j | \varphi_E \rangle + \sum_{i=1}^N b_i \langle \phi_j | \varphi_{E,i}^{(2)} \rangle \quad (31)$$

Man muß also nur noch dieses inhomogene lineare Gleichungssystem vom Grade N lösen. Die Wellenfunktion des modifizierten Kontinuums lautet dann:

$$|\tilde{\psi}_E\rangle = a(|\psi_E\rangle - \sum_{i,j}^N (\langle\phi_k|\varphi_{E_i}^{(2)}\rangle^{-1} \langle\phi_j|\varphi_E\rangle |\varphi_{E,i}^{(2)}\rangle) \quad (32)$$

Die Ausdehnung auf mehrere Resonanzen wird allerdings in der vorliegenden Arbeit nicht benötigt, da der $2s\sigma$ - Zustand erst bei $Z \approx 245$ überkritisch wird, was im Schwerionenstoß nicht erreicht werden kann. Der $2p_{1/2}\sigma$ - Zustand taucht zwar bei $Z \approx 185$ ein, koppelt jedoch in symmetrischen Systemen, und allgemein in der Monopolnäherung, nicht mit dem $Es\sigma$ - Kontinuum, sodaß er in diesen Fällen in einer unabhängigen Rechnung als einzelne Resonanz behandelt werden kann.

Der durch Projektion konstruierte Satz von Zuständen $|\varphi_{E_e}\rangle$, $|\varphi_n\rangle$, $|\phi_R\rangle$, $|\tilde{\varphi}_{E_p}\rangle$ kann als Basis in der Entwicklung (II.10) der zeitabhängigen Wellenfunktion verwendet werden. Dies führt wieder zu den Differentialgleichungen (II.12), jedoch mit einem zusätzlichen Kopplungsterm aufgrund der Nichtdiagonalität des Hamiltonoperators

$$\langle\tilde{\varphi}_{E_p}|\frac{\partial}{\partial t}|\phi_R\rangle + i\langle\tilde{\varphi}_{E_p}|H|\phi_R\rangle = 0 \quad (33)$$

Diese Kopplung ist auch wirksam, wenn die Kerne sich nicht bewegen, kann also in Übereinstimmung mit Kap. V als spontaner Zerfall der Resonanz interpretiert werden. Die Zerfallsbreite ist $\Gamma(E_p) = 2\pi |\langle\tilde{\varphi}_{E_p}|H|\phi_R\rangle|^2$, (34)

im unterkritischen Bereich verschwindet sie, da $|\varphi_{E_p}\rangle$ und $|\phi_R\rangle$ dort Eigenzustände von H sind.

Der entwickelte Formalismus erlaubt also durch (33) die Unterscheidung spontaner und induzierter Übergänge, die beide allerdings kohärent addiert werden müssen. Eine solche Aufspaltung enthält natürlich eine gewisse Willkür, da sie von der Wahl der physikalisch nicht meßbaren Basis abhängt. Dennoch lassen sich Situationen vorstellen, in denen man das unterschiedliche Zeitverhalten der Kopplungen in (33) studieren kann (siehe Kap. X) .

3) Wellenfunktionen und Matrixelemente

Bisher wurde noch nicht darauf eingegangen, wie die Wellenfunktion des Resonanzzustandes $|\phi_R\rangle$ gewonnen werden kann. Am naheliegendsten ist es, die Kontinuumswellen φ_{E_p} bei der Resonanzenergie E_r zu verwenden und nach außen abzuschneiden:

$$\phi_R(r) = C \varphi_{E_r}(r) \Theta(r_c - r) . \quad (35)$$

Die Konstante C wird durch Normierung bestimmt:

$$C = \left(\int_0^{r_c} dr \varphi_{E_r}^+ \varphi_{E_r} \right)^{-1/2} \quad (36)$$

Durch eine solche Wahl wird erreicht, daß ϕ_R im wesentlichen die Gestalt einer gebundenen, 1s-artigen Wellenfunktion annimmt. Der Abschneideradius r_c sollte im Bereich der zu durchtunnelnden Barriere liegen (vgl. Abb. 2). Diese wird definiert durch $r_- < r < r_+$ mit $E_r - V(r_{\pm}) \pm m = 0$.

Bei größeren Abständen setzt das oszillatorische "Kontinuums"-Verhalten von φ_{E_p} ein.

Numerische Rechnungen haben gezeigt, daß insbesondere die radialen Kopplungsmatrixelemente sensitiv auf das Abschneideverfahren sind. Für die folgenden Untersuchungen wurde ein Wert für r_c verwendet, der etwas kleiner ist als r_+ . Gleichzeitig wurde die Wellenfunktion nicht scharf abgeschnitten, sondern erhielt einen exponentiellen Abfall. Dies kann durch einen Kunstgriff erreicht werden, indem das Potential verändert wird:

$$\tilde{V}(r) = \theta(r_c - r) V(r) + \theta(r - r_c) V(r_c). \quad (37)$$

Für Abstände $r > r_c$ ist $\tilde{V}$ mit dem normalen Coulombpotential identisch, weiter außen wird das Potential konstant gehalten, sodaß die Energie weiterhin innerhalb des "gap" - Bereiches liegt und die Wellenfunktion stetig auf Null abfällt. r_c wurde so festgelegt, daß $E_r - V(r_c) = -\gamma m$. Es wurde $\gamma = 0.9$ verwendet, was einen Abschneideradius nahe am Umkehrpunkt r_+ liefert. Mit diesem Wert erhält man einen stetigen Übergang zwischen dem unter- und überkritischen Bereich, was für kleinere Abschneideradien nicht erfüllt ist. Die Übereinstimmung zwischen der Eigenenergie von $H = T + V$ und der exakten Resonanzenergie ist besser als 1 keV.

Die nach diesem Verfahren berechneten Matrixelemente werden in den folgenden Figuren für die Systeme mit Gesamtladung $Z = 184$ (U-U) und $Z = 190$ (U-Cf) dargestellt. Wie überall in dieser Arbeit wird die Monopolnäherung verwendet, unter Berücksichtigung des endlichen Kernradius. Als zugehöri-

ge kritische Kernabstände wurden die Werte $R_{cr} = 32.5 \text{ fm}$ bzw. 43.5 fm gefunden.

Zunächst untersuchen wir die Zerfallsbreite des überkritischen $1s$ - Zustands, die nach (21) durch das Matrixelement $\langle \phi_R | H | \psi_{E_p} \rangle$ bei $E_p = E_r$ bestimmt ist. Abb. 11 zeigt die Abhängigkeit der Breite als Funktion des Zweizentrenabstands. Der sehr steile Abfall bei größeren R , d. h. geringer Eintauchtiefe, beruht hauptsächlich auf der Verdrängung der Positronenwellenfunktion durch das Coulombpotential oder (was dasselbe ist) auf der Ausdehnung der Tunnelbarriere. Offenbar ist es notwendig, die Kerne einander möglichst nahe zu bringen, um überhaupt einen merklichen Beitrag der spontanen Positronenerzeugung zu erhalten.

Der Wert für $\Gamma(E_r)$ ist weitgehend unabhängig vom verwendeten Abschneideverfahren für ϕ_R . Auch stimmt er gut überein mit der "exakten" Breite, die durch Phasenanalyse der Wellenfunktion φ_{E_p} nach Gl. (20) bestimmt werden kann.^{82), 83)} Abb. 12 illustriert diese Analyse für das U-U-System bei $R = 16 \text{ fm}$ Kernabstand. Als Funktion der Positronenenergie E_p ist im oberen Teil die "Resonanzüberhöhung" der Wellenfunktion φ_{E_p} dargestellt. Sie ist hier definiert als der Quotient von Maximum (es liegt bei etwa $r = 15 \text{ fm}$) und asymptotischer Amplitude der großen Komponente u_1 der Wellenfunktion. Die untere Hälfte der Abb. zeigt die Streuphase des alten Kontinuums φ_{E_p} und des modifizierten Kontinuums $\tilde{\varphi}_{E_p}$. Die Phase δ zeigt das typische Resonanzverhalten mit einer schwach energieabhängigen Grundphase, die von einem steilen Anstieg um π überlagert ist. Aus dem Verlauf von δ

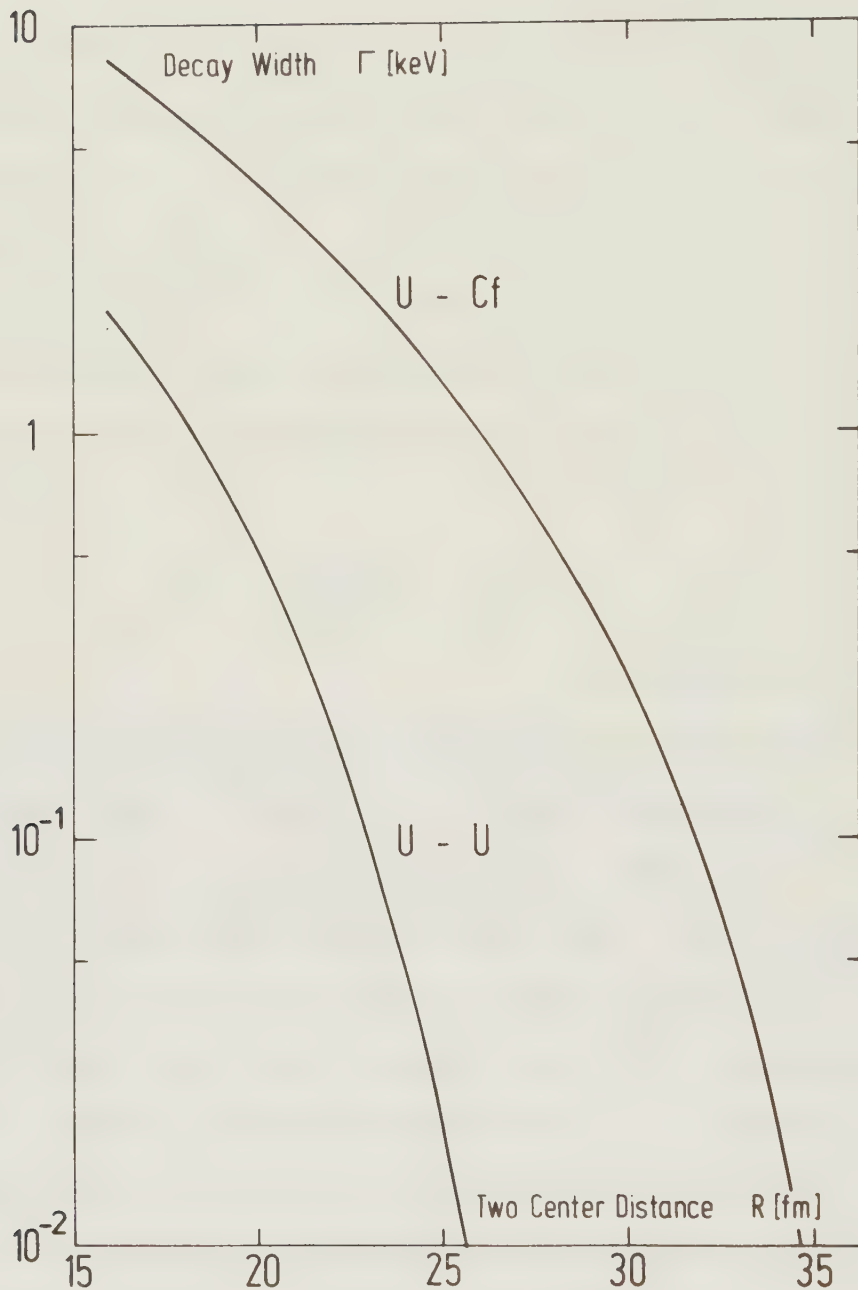


Abb. 11: Zerfallsbreite Γ des eingetauchten $1s$ -Zustands, berechnet im Rahmen des Projektionsformalismus:

$$\Gamma = 2\pi |\langle \phi_R | H | \tilde{\varphi}_{E_p} \rangle|^2 \quad \text{bei } E_p = E_{\text{res}}.$$
 Die Breite ist vom Abschneideverfahren unabhängig und stimmt gut überein mit den aus der Phasenanalyse der Resonanz gewonnenen Werten.

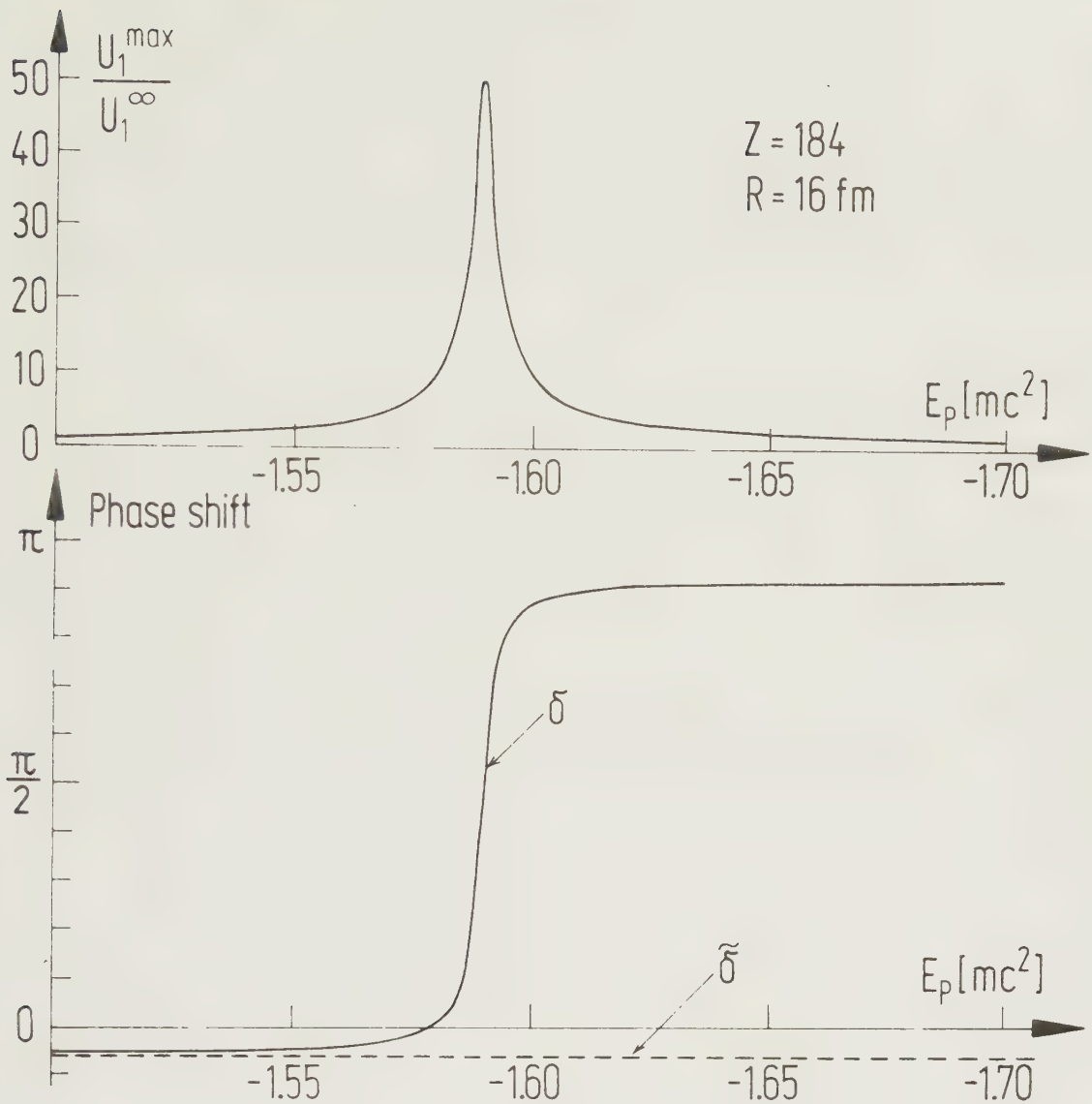


Abb. 12: Die 1s - Resonanz im U-U -System bei einem Zweizentrenabstand $R = 16$ fm. Oben: Die "Resonanzüberhöhung" der Wellenfunktion φ_{E_p} . Unten: Variation der Streuphase von φ_{E_p} mit der Positronenenergie. Die Phase δ zeigt einen Anstieg um π an der Resonanzposition, während $\tilde{\delta}$ glatt verläuft.

kann man die Resonanzparameter $E_r = -1.5894 \text{ mc}^2$ und $\Gamma = 2.0 \text{ keV}$ deduzieren. Die Breite stimmt sehr gut überein mit dem Wert, den man aus Abb. 11 entnehmen kann. Das Abschneideverfahren liefert $E_r = -1.5906 \text{ mc}^2$ und $\Gamma = 1.97 \text{ keV}$. Im Gegensatz zu δ verläuft die Streuphase δ' völlig glatt was beweist, daß die Resonanz aus dem Kontinuum entfernt wurde.

Wir untersuchen nun etwas detaillierter die Struktur der Kopplungsmatrixelemente, die zur Positronenerzeugung beitragen. Abb. 13 zeigt die Abhängigkeit von $\langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ als Funktion der Positronenenergie für die beiden Systeme $Z = 184, 190$. Festgehalten wurde jeweils der Zweizentrenabstand R . Neben dem Coulomb-Verdrängungseffekt bei kleinen kinetischen Positronenenergien zeigen die Kurven ein breites Maximum. Im Gegensatz zum Wert bei $E_p = E_r$, welcher die spontane Zerfallsbreite im statischen Grenzfall bestimmt, ist allerdings die genaue Gestalt der Kurven und der Vorzeichenwechsel bei großen E_p beträchtlich vom Abschneideverfahren abhängig.

Dasselbe gilt auch für den detaillierten Verlauf der radialen Kopplungsmatrixelemente $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle$ zwischen Resonanzzustand und modifiziertem Positronen-Kontinuum. Sie sind in den Abb. 14 und 15 als Funktion des internuklearen Abstands dargestellt. Zunächst fällt auf, daß die Kopplungen im über- und unterkritischen Bereich bei $R = R_{cr}$ völlig glatt ineinander übergehen, was eine Grundforderung an das verwendete Verfahren war. Dazu ist noch zu bemerken, daß $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle$ durch numerische Differentiation der Resonanz-Wellenfunktion

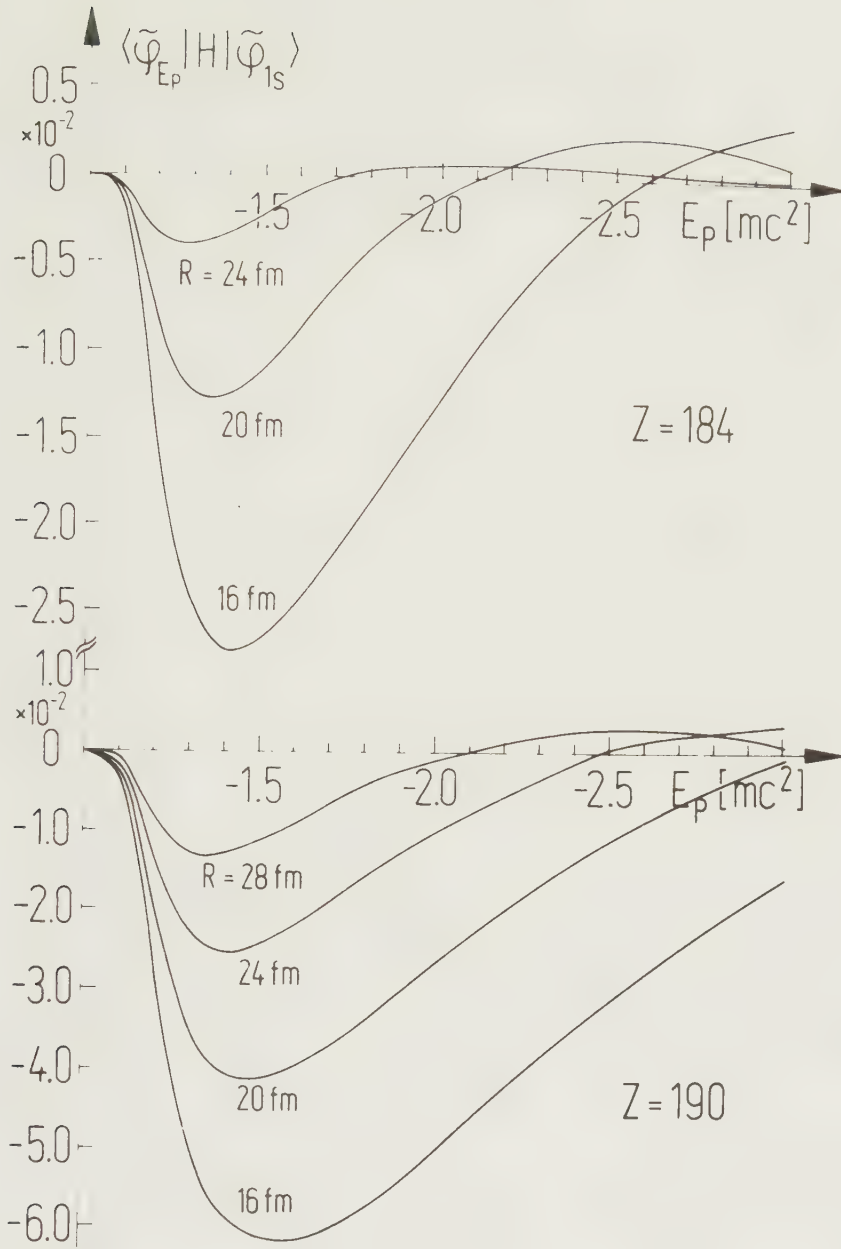


Abb. 13: Abhängigkeit der Kopplungsmatrixelemente $\langle \tilde{\varphi}_{E_p} | H | \phi_R \rangle$ von der Positronenenergie E_p für die Systeme U - U (oben) und U - Cf (unten).

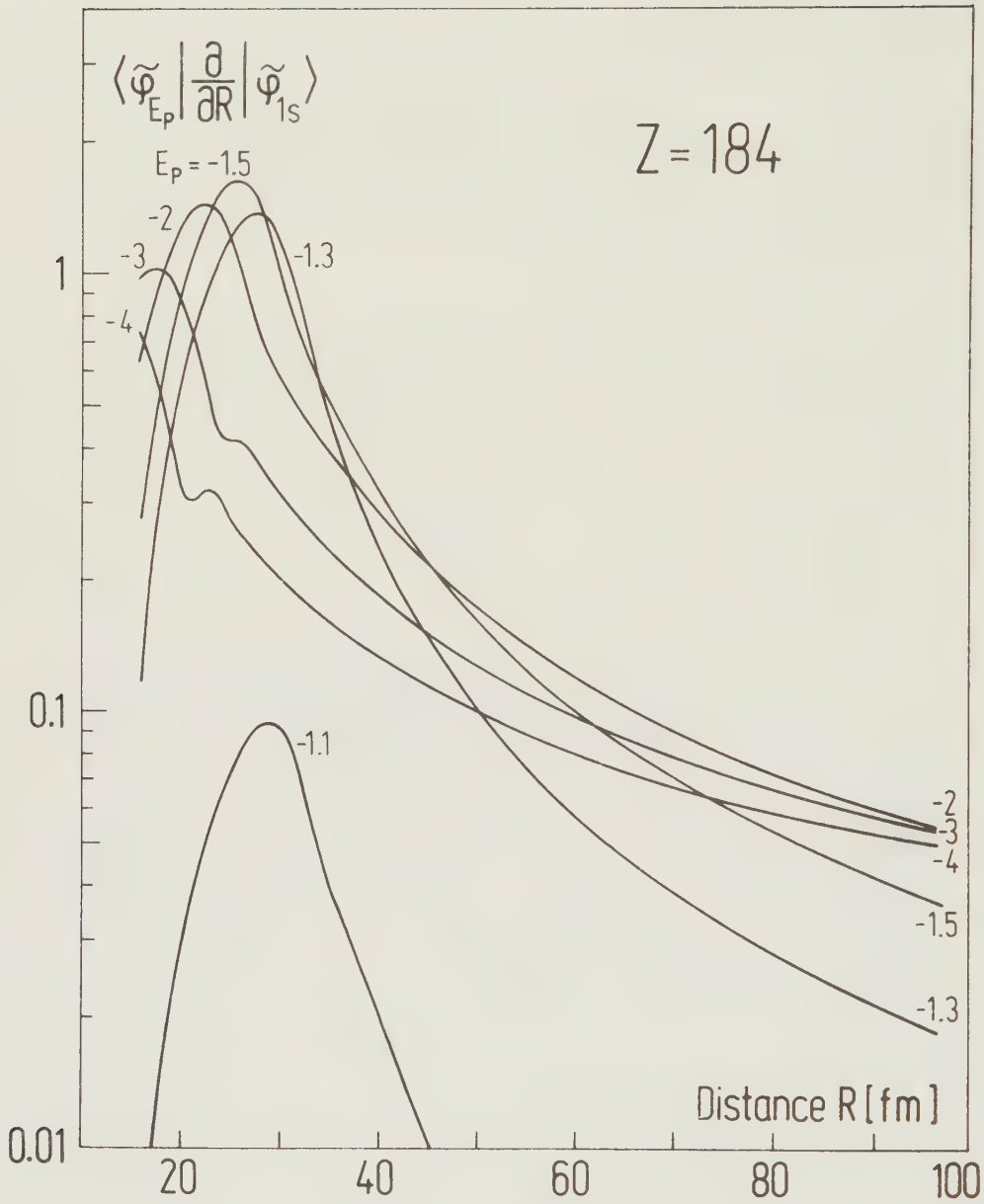


Abb. 14: Das Matrixelement $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | \partial / \partial R | \phi_R \rangle$ der radialen Kopplung als Funktion des internuklearen Abstands R für verschiedene Positronenenergie E_p im U-U-System.

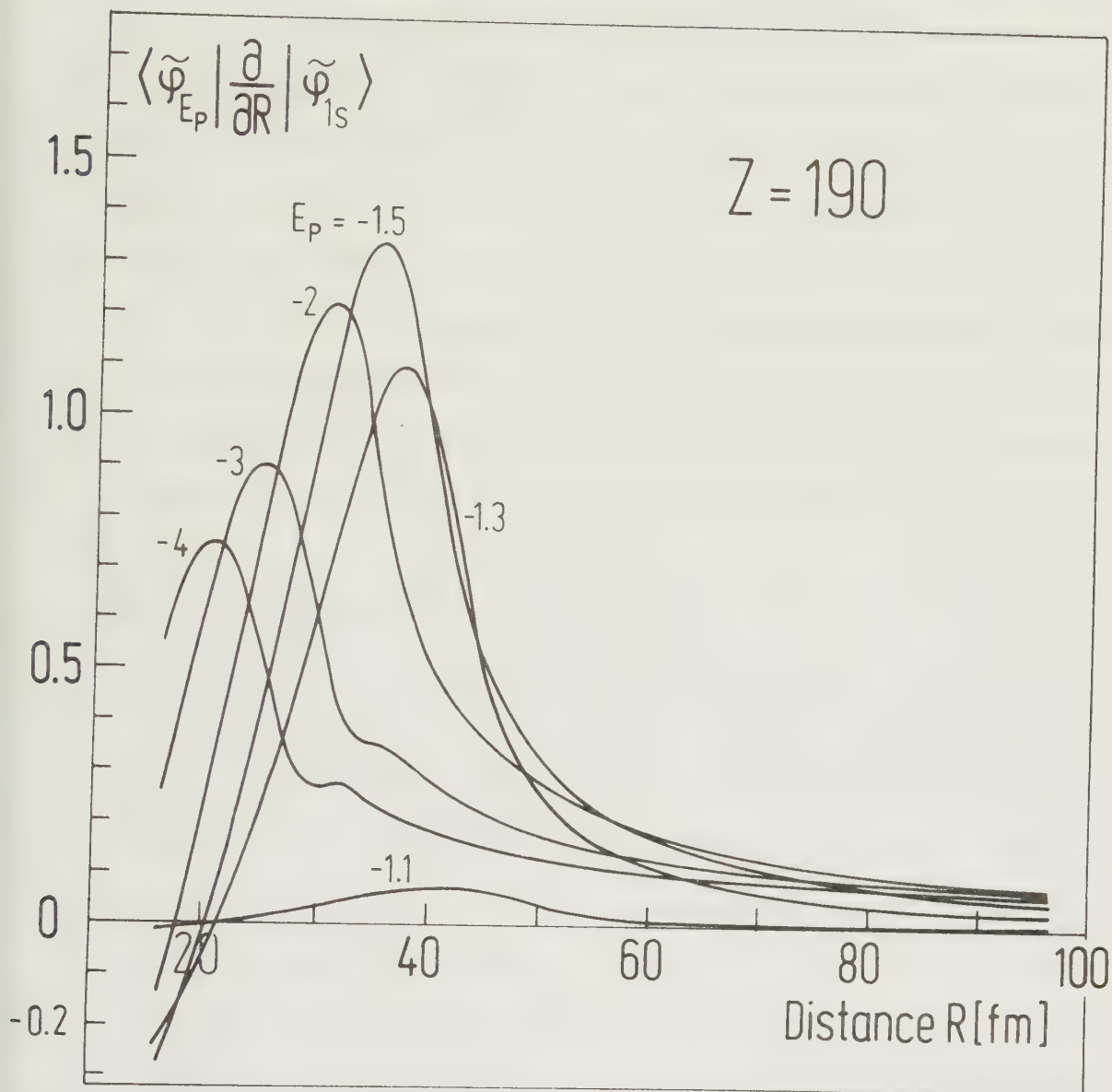


Abb. 15: Wie Abb. 14, jedoch für das U - Cf -System.

ϕ_R nach dem Parameter R berechnet wurde, während im unterkritischen Bereich die Hellmann-Feynman-Identität (IV.16) verwendet werden konnte.

Im überkritischen Bereich, d. h. $R < R_{cr}$, erreichen die meisten Matrixelemente ein Maximum, um bei kleineren Abständen wieder abzufallen. Im U-Cf-System, Abb. 15, können sie sogar das Vorzeichen wechseln. Die Lage des Maximums wird mit wachsender Positronenenergie zu kleineren Kernabständen verschoben. Grob kann man feststellen, daß die Kopplung dort am größten ist, wo sich der Resonanzzustand und die Kontinuums- welle energetisch besonders nahe kommen (das gilt allerdings nur qualitativ).

Mit Ausnahme der Matrixelemente zum Resonanzzustand ϕ_R verhalten sich alle anderen radialen Kopplungen des modifizierten Kontinuums $\tilde{\psi}_{E_p}$ normal und wachsen bei kleinen Kernabständen monoton an. Dies ist ein weiterer Test für das gewählte Abschneideverfahren. Das gegenläufige Verhalten der Kopplungen $\langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ und $\langle \phi_R | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ bei kleinen Abständen deutet schon an, daß "spontane" und "induzierte" Positronenerzeugung, die ja kohärent addiert werden müssen, sich gegenseitig ergänzen werden (siehe dazu die Ergebnisse der dynamischen Rechnungen in IX.3)

Wir müssen nun noch auf einige Eigenschaften des benutzten Projektionsverfahrens eingehen. Ein Hauptproblem ist die Orthogonalität $\langle \psi_\alpha | \phi_R \rangle = 0$, die bei der Entwicklung des Formalismus vorausgesetzt wurde, bei willkürlicher Wahl von ϕ_R aber nicht exakt erfüllt sein wird. Eine Möglichkeit der Abhilfe

bestünde darin, die φ_α nach dem Schmidt'schen Verfahren explizit auf ϕ_R zu orthogonalisieren. Da der Satz auch die Zustände φ_{E_e} des oberen Kontinuums enthält, wäre dies allerdings problematisch. Auch eine Berechnung modifizierter Zustände mit Hilfe der Gl. (12) wäre denkbar (allerdings ließe sich für die gebundenen Zustände das Integrationsverfahren nicht anwenden, sie müßten iterativ aus Gl. (12) bestimmt werden.)

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden Fehler aufgrund des Überlapps $\langle \varphi_\alpha | \phi_R \rangle$ vernachlässigt. Mit dem verwendeten Abschneideverfahren (37) erreichen die $\langle \varphi_{ns} | \phi_R \rangle$ maximal (U-Cf bei $R = 16$ fm) den Wert $1.5 \cdot 10^{-2}$. Die Summe $(\sum_n |\langle \varphi_n | \phi_R \rangle|^2 + \int dE_e |\langle \varphi_{E_e} | \phi_R \rangle|^2)^{1/2}$ bleibt kleiner als $2.5 \cdot 10^{-2}$.

Eine Konsequenz der Nichtorthogonalität der Basiszustände ist die Verletzung der Hermitezität der Kopplungsmatrix, da (für reelle Wellenfunktionen)

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_j \rangle + \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_i \rangle \quad (38)$$

Um die Normierung der zeitabhängigen Wellenfunktion zu erreichen, müßte daher die variable Überlappmatrix in die gekoppelten Differentialgleichungen einbezogen werden (vgl II.13). Für die dynamischen Rechnungen in Kap. IX wurde die Nichtorthogonalität der Basis vernachlässigt und dementsprechend auch die Kopplungsmatrix näherungsweise als antihermitesch behandelt.

Zum Schluß dieses Abschnitts sollen noch die Kopplungen des modifizierten Kontinuums $\tilde{\varphi}_{E_p}$ mit höherliegenden Zuständen

untersucht werden. Zunächst läßt sich zeigen, daß sich der Überlapp $\langle \psi_\alpha | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ auf die schon diskutierte Orthogonalität mit ϕ_R zurückführen läßt. Projektion der Grundgleichung (12) auf $\langle \psi_\alpha |$ liefert nämlich

$$\langle \psi_\alpha | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle = \frac{\langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle}{E_\alpha - E_p} \langle \psi_\alpha | \phi_R \rangle . \quad (39)$$

Für die radialen Kopplungen ist die Hellmann-Feynman-Identität (IV.16) nicht unmittelbar anwendbar. Es ist aber nicht notwendig, die Kontinuumswellenfunktion numerisch zu differenzieren, um $\langle \psi_\alpha | \partial/\partial R | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ zu bilden. Die direkte numerische Berechnung wäre besonders ungünstig für Zustände ψ_α im kontinuierlichen Spektrum, da das Radialintegral in diesem Fall nicht absolut konvergiert. Man kann jedoch das Matrixelement von $[\frac{\partial}{\partial R}, H]$ zwischen den Zuständen $\langle \psi_\alpha |$ und $| \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ bilden. Dies liefert einerseits $\langle \psi_\alpha | \frac{\partial H}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$ und andererseits $\langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle - E_\alpha \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$. Mit (12) läßt sich dies umformen

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle &= E_p \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle + V_{E_p}^* \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle \\ &+ \frac{\partial V_{E_p}^*}{\partial R} \langle \psi_\alpha | \phi_R \rangle \end{aligned}$$

mit der Abkürzung $V_{E_p}^* = \langle \phi_R | H | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle$.

Also folgt für die gesuchte Kopplung

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle &= \frac{1}{E_p - E_\alpha} (\langle \psi_\alpha | \frac{\partial H}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle - V_{E_p}^* \langle \psi_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle \\ &- \frac{\partial V_{E_p}^*}{\partial R} \langle \psi_\alpha | \phi_R \rangle) . \end{aligned} \quad (40)$$

Gegenüber dem alten Resultat enthält dieser Ausdruck einen Zusatzterm proportional zu Zerfallsmatrixelement V_{E_p} und eine Überlappkorrektur. Der zweite Term in (40) vermindert das Matrixelement und kann sehr groß werden, während der Orthogonalitätsfehler kleiner als 10% bleibt.

Für die Kontinuum-Kontinuum-Kopplung erhält man analog zu (40)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle &= (\langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial H}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle + V_{E_p}^* \langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle \\ &\quad - V_{E_p}^* \langle \phi_R | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\psi}_{E_p} \rangle) \cdot \frac{1}{E_p' - E_p} \end{aligned} \quad (41)$$

VIII) Numerische Ergebnisse: Störungstheorie

1) Näherungen und Formulierung der Störungstheorie

Nach der ausführlichen Diskussion der Grundlagen für eine dynamische Beschreibung elektronischer Anregungen im Schwerionenstoß sollen nun konkrete Rechnungen zur Erzeugung von Löchern, δ -Elektronen und vor allem Positronen vorgestellt werden. Dabei werden zunächst die im Modell verwendeten Näherungen und die numerische Methode dargestellt, anschließend werden einige Eigenschaften der störungstheoretisch berechneten Anregungsamplituden und -wahrscheinlichkeiten diskutiert. Störungstheoretische Rechnungen mit dem hier benutzten Modell sind schon in einer Reihe von Arbeiten zur Locherzeugung¹⁰²⁻¹⁰⁴⁾, -Elektronenemission¹⁰⁵⁾ und Positronenerzeugung^{34), 106), 107)} veröffentlicht, sodaß ihre ausführliche Beschreibung hier nicht notwendig ist. Das Hauptgewicht soll vielmehr auf den gekoppelten-Kanal-Rechnungen liegen, die im nächsten Kapitel behandelt werden. Dort werden auch Rechnungen zur Positronenerzeugung in überkritischen Stößen und Vergleiche mit vorliegenden Experimenten durchgeführt.

Zunächst eine kurze Zusammenstellung der benutzten Näherungen:

(i) Alle Wellenfunktionen und Matrixelemente werden in Monopolnäherung (siehe IV.1) berechnet. Dadurch wird das Problem des Zwei-Zentren-Kontinuums umgangen. Für radiale Coulombanregung ist das Modell zuverlässig, Rotationskopplung und Anregungen durch Elektronenpromotion können nicht beschrieben

werden. Das Modell eignet sich auch für schwach asymmetrische Systeme, die als quasi symmetrisch behandelt werden.

(ii) Es werden nur Zustände mit $|\kappa| = 1$, also $s_{\frac{1}{2}}$ und $p_{\frac{1}{2}}$ berücksichtigt. Für diese Niveaus ist die relativistische Kontraktion der Wellenfunktionen besonders ausgeprägt, was zu starken radialen Kopplungen führt. Anregungen in andere Niveaus sind schwächer und werden vernachlässigt. Wegen unterschiedlicher Parität koppeln die $\kappa = +1$ und $\kappa = -1$ Niveaus untereinander nicht.

(iii) Die Rechnung berücksichtigt nur das instantane Coulombpotential der stoßenden Kerne. Nach bisherigen Untersuchungen führt das durch die Kernbewegung erzeugte Magnetfeld (siehe Anhang A) nur zu Korrekturen im Prozentbereich, wenn man von Polarisationsseffekten absieht^{59), 108)}. Veränderungen des Potentials durch QED-Effekte (Vakuumpolarisation, Selbstenergie) werden nicht berücksichtigt. Nach theoretischen Vorhersagen²⁰⁻²²⁾ sollten sie schwach sein (Energieverschiebung im Bereich von 10 keV) und sich gegenseitig weitgehend aufheben. In Zukunft wird es vielleicht gelingen, durch Vergleich von Theorie und Experiment zur Loch- und Positronenerzeugung Rückschlüsse auf die Größe dieser Effekte zu ziehen.

(iv) Alle Wirkungen der Elektron-Elektron-Wechselwirkung werden vernachlässigt. Diese Näherung ist zumindest für schwächer gebundene Niveaus nur bedingt gerechtfertigt. Untersuchungen von Riha¹⁰⁹⁾ et al. weisen darauf hin, daß der nicht-diagonale Anteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung für innere Zustände unberücksichtigt bleiben darf, da die zugehörige Relaxationszeit beträchtlich größer ist, als die zur

Verfügung stehende Stoßzeit. Der Diagonalterm, also eine Verschiebung der Energieniveaus durch Abschirmung, bleibt auf jeden Fall wirksam. Dies wurde nur in einigen schematischen Testrechnungen berücksichtigt, alle im folgenden präsentierten Resultate enthalten keine Abschirmkorrekturen.

Wenn hohe quantitative Genauigkeit angestrebt wird, kann auf die Berücksichtigung der Abschirmung nicht verzichtet werden. In einem ersten Schritt kann man mit durch Abschirmung verringerten Bindungsenergien rechnen, die man sich am besten durch molekulare Thomas-Fermi- oder Hartree-Fock-Rechnungen beschafft oder grob durch Vergleich zwischen den bekannten Ein- und Vielelektronenenergien¹¹⁰⁾ im atomaren Grenzfall $R \rightarrow 0, \infty$. Darüber hinaus sollten aber auch abgeschirmte Wellenfunktionen zur Berechnung der Kopplungsmatrixelemente verwendet werden. Ob sich eine Skalierungsregel mit effektiven Kernladungen im Sinne der Regeln von Slater¹¹¹⁾ finden läßt, ist fraglich, da sich die atomaren Schalen in den interessierenden Stößen stark überlappen.

Unter Verwendung dieser Näherungen sollen die gekoppelten-Kanal-Gleichungen (II.12) - entweder direkt oder in Störungstheorie - mit den Kopplungen aus Kap. IV.3 und VII.3 integriert werden. Für die Kernbewegung $R(t)$ wird dabei eine Rutherford-Hyperbelbahn angenommen, also die Lösung der klassischen Bewegungsgleichung für die Streuung zweier mit $Z_1 e$ und $Z_2 e$ geladener Coulombzentren. Sie läßt sich günstig durch eine häufig benutzte Parametrisierung mittels Hyperbelfunktionen darstellen:

$$\begin{aligned} R(w) &= a (\varepsilon \operatorname{ch} w + 1) \\ t(w) &= \frac{a}{v} (\varepsilon \operatorname{sh} w + w) \end{aligned} \quad (1)$$

mit

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\mu v^2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_{\text{cm}}} \quad , \quad (2)$$

$$\varepsilon^2 = 1 + \left(\frac{b}{a}\right)^2 = \frac{1}{\sin^2 \theta/2} \quad (3)$$

Dabei ist v die Einschußgeschwindigkeit (Laborsystem) und E_{cm} die Einschußenergie (Schwerpunktssystem), $\mu = M_P M_T / (M_P + M_T)$ die reduzierte Masse, ε die Exzentrizität der Hyperbel, b der Stoßparameter und θ der Streuwinkel im Schwerpunktssystem. Der Parameter $2a$ (Abstand kleinster Annäherung in Zentralstößen) läßt sich gut zur Charakterisierung der Stoßenergie verwenden. Kleine Abweichungen von der Hyperbelbahn werden nur durch elektronische Abschirmung, das Vakuumpolarisationspotential sowie durch den Energieverlust infolge von Coulombanregung der Kerne hervorgerufen. Sie können in schweren Stoßsystemen vernachlässigt werden¹¹²⁾. Dies gilt natürlich nicht mehr für Stöße oberhalb der Coulombbarriere, wenn die Kernkräfte wirksam werden (siehe Kap. X).

Die Formulierung der zeitabhängigen Störungstheorie folgt sofort aus den gekoppelten-Kanal-Gleichungen. Wenn man annimmt, daß die Anregungen schwach sind, also $a_{ii} \approx 1$ und $a_{if} \ll 1$ für $f \neq i$, dann darf man auf der rechten Seite der Differentialgleichung $a_{if}(t) \approx \delta_{if}$ als Konstante approximieren und erhält ein einfaches Integral

$$a_{if}^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial t'} + i H | \varphi_i \rangle e^{-i(\chi_i(t') - \chi_f(t'))} \quad (4)$$

Die Übergangsamplitude ähnelt also der Fouriertransformierten des Kopplungsmatrixelements. Bei Verwendung des quasimolekularen Modells ist die Übergangsfrequenz $E_i(t) - E_f(t)$ variabel. Aus der Zeitstruktur des Integranden lassen sich Schlüsse auf die Anregungen ziehen. Vieles läßt sich auf kinematische Umstände zurückführen. Die typische Stoßfrequenz ist

$$\omega_0 = \frac{v}{a} \quad (5)$$

damit folgt der "Adiabasieparameter"

$$\xi = \frac{\Delta E}{v/a} \quad (6)$$

als das Verhältnis von Übergangsenergie und in der Bahnbewegung auftretender Fourierfrequenz. Der Abfall der Anregungswahrscheinlichkeit mit der Energie des Endzustands, etwa im δ -Elektronenspektrum, oder die Einschußenergie-Abhängigkeit für einen bestimmten Übergang verlaufen annähernd exponentiell mit dem Adiabasieparameter. Der "adiabatische Radius"

$$r_{ad} = \frac{v}{\Delta E} \quad (7)$$

bestimmt den typischen Längenbereich in dem eine Anregung erfolgt. Er kann grob mit dem wirksamen mittleren Stoßparameter identifiziert werden.

Skalierungsregeln mittels dieser kinematischen Parameter erweisen sich als erstaunlich erfolgreich¹¹³⁾⁻¹¹⁵⁾. Sie können aber nur zu einer ersten Orientierung dienen, da sie den Verlauf von Kopplungsmatrixelementen und Energieniveaus nicht berücksichtigen. Eine approximative Lösung des Integrals (4)

wurde in Ref. 116) abgeleitet. Die resultierende analytische Formel gibt die numerischen Ergebnisse recht gut wieder. Sie kann zu einer Analyse der gemessenen Daten, insbesondere zum Beginn einer Spektroskopie der quasimolekularen Energien verwendet werden.

Mit (4) läßt sich nach (III.16) die Positronenerzeugung aus anfänglich leeren gebundenen Orbitalen und die direkte Paarerzeugung durch Übergänge zwischen den Kontinua beschreiben. Da die inneren Schalen normalerweise unterhalb der Fermikante F liegen, können sie in erster Ordnung nicht beitragen. Vielmehr muß dort zuerst ein Loch erzeugt werden, welches dann in einem zweiten Schritt als Positron freigesetzt wird. Obwohl es sich hier um einen Prozess von höherer (mindestens zweiter) Ordnung handelt, ist sein Beitrag doch wichtig. Die Berechnung dieses Effektes ist ja gerade ein Hauptziel der vorliegenden Arbeit.

Die tiefsten Niveaus, insbesondere $1s\bar{\epsilon}$ und $2p\frac{1}{2}\bar{\epsilon}$ kommen im Stoß dem unteren Kontinuum nahe und koppeln sehr stark. Andererseits ist auch die Locherzeugungsrate in diesen Niveaus nicht vernachlässigbar klein. Die Rechnungen werden zeigen, daß die Prozesse erster und zweiter Ordnung etwa gleich stark beitragen.

Die Amplitude für den Zweistufen-Übergang lautet:

$$a_{if;r}^{(2)} = - \int_{-\infty}^t dt' \langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial t'} + iH | \varphi_r \rangle e^{-i(\chi_r - \chi_f)} a_{ir}^{(1)} \quad (8)$$

Die gesamte Übergangsamplitude errechnet sich durch kohärente Summation aller Beiträge in erster und zweiter Ord-

nung

$$a_{if} = a_{if}^{(1)} + \sum_r a_{if;r}^{(2)} + \dots \quad (9)$$

Für die im nächsten Abschnitt diskutierten numerischen Resultate wurden entsprechend dieser Gleichung der direkte Paarerzeugungsbeitrag $a_{E_e E_p}^{(1)}$ und die Zweistufenbeiträge aus den jeweils drei tiefsten gebundenen Niveaus $a_{E_e E_p;n}^{(2)}$ ($n = 1s\sigma$, $2s\sigma$, $3s\sigma$; $2p\frac{1}{2}\sigma$, $3p\frac{1}{2}\sigma$, $4p\frac{1}{2}\sigma$) addiert. Die beiden Drehimpulskanäle $\kappa = \pm 1$ koppeln nicht miteinander und werden inkohärent behandelt.

2) Ausgewählte Ergebnisse

Mit den im letzten Abschnitt beschriebenen Näherungen wurden die Integrale (4) und (9) für direkte Paarerzeugung, Locherzeugung und induzierte Positronenerzeugung aus tief gebundenen molekularen Zuständen gelöst. Es wurde die Trapezregel verwendet. Der Integrationsbereich reicht bis zu Kernabständen von 3000 fm und wurde in drei Bereiche mit jeweils 500 Stützpunkten aufgeteilt. Während die Region stärkster Kopplung (bis 300 fm) durch lineare Integration im Parameter w aus Gl. (1) aufgespreizt wurde, mußte bei größeren Abständen linear in R integriert werden, da sonst wegen des oszillierenden Phasenfaktors der Abstand der Stützpunkte zu groß geworden wäre. Die radialen Matrixelemente und die Bindungsenergien wurden mit einem Potenzgesetz interpoliert und bei größeren Kernabständen ebenso extrapoliert.

Die in Monopolnäherung und allgemein die im quasimolekula-

ren Modell berechneten Kopplungsmatrixelemente fallen asymptotisch zu schwach ab. Um die numerische Konvergenz der Integrale sicherzustellen wurde ein Abschneidefaktor der Gestalt

$$f(R) = \begin{cases} 1 & R \leq R_0 \\ e^{- (R - R_0)^2 / \xi^2} & R > R_0 \end{cases} \quad \text{für}$$

beimultipliziert. Dieser simuliert den Effekt der korrekt durch Einführen von Translationsfaktoren in die molekulare Basis bewirkt wird (siehe II.2).

In den meisten numerischen Rechnungen wurde $R_0 = 1500$ fm und $\xi = 750$ fm verwendet, was durch Untersuchungen¹⁰²⁾ mit asymptotischen Translationskorrekturen für Kopplung zwischen gebundenen $ns\sigma$ -Zuständen nahegelegt wird. Der Faktor (10) ist jedoch nur eine ad-hoc-Korrektur, der Einfluß der Translationseffekte insbesondere für Kontinuumsübergänge wird in zukünftigen Rechnungen detaillierter studiert werden müssen. Fraglich ist vor allem die Verwendung eines gemeinsamen Faktors (10) für alle Übergänge. Es ist zu vermuten, daß dadurch die Beschreibung der höheren gebundenen Zustände, deren Schalen ja wesentlich ausgedehnter sind, als die K-Schale, ungenau wird, und daß die Integration noch zu wesentlich größeren Kernabständen fortgeführt werden müßte. Richtig erfaßt werden nur die Übergänge, die durch das relativistisch bedingte Anwachsen der Matrixelemente bei kleinen Kernabständen hervorgerufen werden.

Für direkte Übergänge (Gl. (4)) kann die Konvergenz des Integrals beschleunigt werden durch eine partielle Integra-

tion⁸⁴⁾. Während die Randterme verschwinden fällt die Ableitung $\frac{d}{dt} (\dot{R} \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_i \rangle)$ wesentlich stärker mit R ab als das Matrixelement selbst. Bei Verwendung des Faktors (10) stimmen die Ergebnisse der direkten numerischen Rechnung und der partiellen Integration gut überein.

Auf Ergebnisse zur Ionisation soll hier nicht näher eingegangen werden, sie sind in Übereinstimmung mit den Resultaten der Referenzen 102)-104). Die Wahrscheinlichkeiten zur K-Locherzeugung sind sehr groß und können bei Zentralstößen 10% erreichen. Für höhere Schalen sind sie noch größer. Frühere Vorhersagen streuten in einem weiten Bereich¹¹⁷⁾⁻¹¹⁹⁾. Mit nichtrelativistischen Modellen wurde $P(0) \lesssim 10^{-5}$ erhalten, was jede Hoffnung auf die Beobachtung von Positronen aus dem $1s\sigma$ -Niveau zunichte gemacht hätte. Das im quasimolekularen Modell gewonnene (und inzwischen experimentell bestätigte) Ergebnis ist auf die starke relativistische Kontraktion der Wellenfunktionen zurückzuführen. Versuche, diesen Effekt nachträglich in die nichtrelativistische Theorie einzubauen erfordert drastische "Korrekturfaktoren" bis zu 10^7 (Ref. 120). Das deutet darauf hin, daß zuverlässige Ergebnisse wohl nur im Rahmen der hier verfolgten voll molekularen Theorie erhalten werden können.

Von Interesse ist der Verlauf der Anregungsamplitude als Funktion der Stoßzeit. Fig. 16 zeigt die Ionisationsamplitude $a_{1s\sigma, E_e}^{(1)}(t)$ in der komplexen Ebene¹⁰³⁾ für $E_e = 2$ im Pb-Pb-Stoß bei $2a = 16$ fm. (Hier und in allen folgenden Darstellungen werden wieder natürliche Einheiten mit $\hbar = c = m = 1$ verwendet. Die Kontinuumsenergien enthalten die

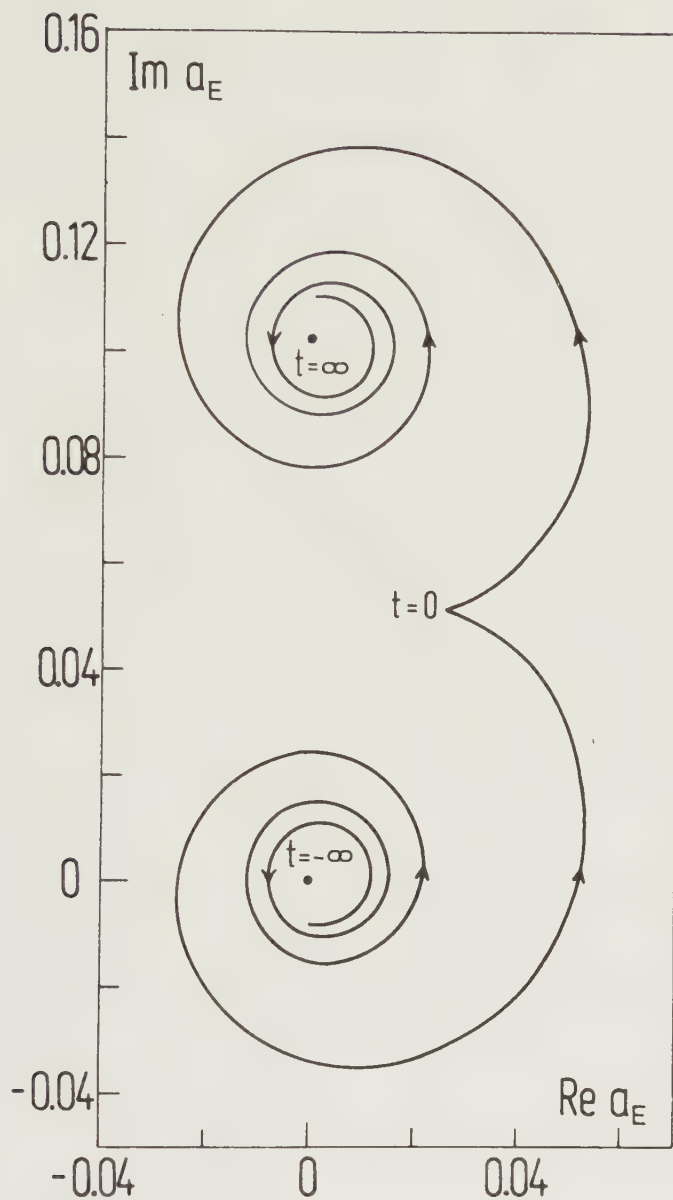


Abb. 16: Bahn der Ionisationsamplitude $a_{1s6, E_e}^{(1)}(t)$ in der komplexen Ebene für Pb-Pb-Stöße mit $b = 0$, $2a = 16$ fm, $E_e = 2$ (aus Ref. 103) .

Ruhmasse des Elektrons.) Die Amplitude beginnt ($t \rightarrow -\infty$) bei 0 und endet ($t \rightarrow +\infty$) bei einem rein imaginären Wert, da die radiale Kopplung eine ungerade Funktion der Zeit ist. Sie durchläuft die Bahn einer doppelten Spirale, deren Knick vom Nulldurchgang der Relativgeschwindigkeit $\dot{R}$ bei $t = 0$ herrührt. Demzufolge wächst die Anregungswahrscheinlichkeit bis $t = 0$ monoton, beginnt dann aber wegen des durch die Richtungsumkehr von $\dot{R}$ erhaltenen Stoßes zu oszillieren bis der Endwert erreicht wird.

Die intermediär auftretende Anregung kann größer werden als dieser asymptotische Wert. Gelänge es etwa, die Bahnbewegung bei $t = 0$ anzuhalten (dies entspräche der Fusion der stoßenden Kerne) so wäre die Anregung durch $|a(0)|^2 = (\operatorname{Re} a(0))^2 + (\operatorname{Im} a(0))^2$ gegeben, statt des üblichen $|a(\infty)|^2 = 2 (\operatorname{Im} a(0))^2$. Der Realteil der Amplitude $a(0)$ (der normalerweise nicht meßbar ist) ist also ein Maß für die intermediären Anregungen und damit für die Adiabasie des Stoßes. $\operatorname{Re} a(0)$ und $\operatorname{Im} a(0)$ sind in Fig. 17 für das Pb-Pb-System bei $2a = 15.8$ fm (5.9 MeV/u) und $2a = 25$ fm als Funktion der Energie des ionisierten $1s_6$ Elektrons aufgetragen. Deutlich ist zu erkennen, daß das Verhältnis zwischen Real- und Imaginärteil mit der Übergangsenergie anwächst und mit der Stoßgeschwindigkeit abnimmt. Dies entspricht dem Verhalten des Adiabasieparameters ξ aus Gl. (6).

Für mehrstufige Anregungen liegen die Verhältnisse ähnlich. Abb. 18 zeigt in Analogie zu Abb. 16 die Amplitude zweiter Ordnung $a_{E_e E_p; 1s_6}^{(2)}(t)$ für induzierte Positronenerzeugung aus dem $1s_6$ Niveau. Da hier der Integrand mit der zeitabhängigen

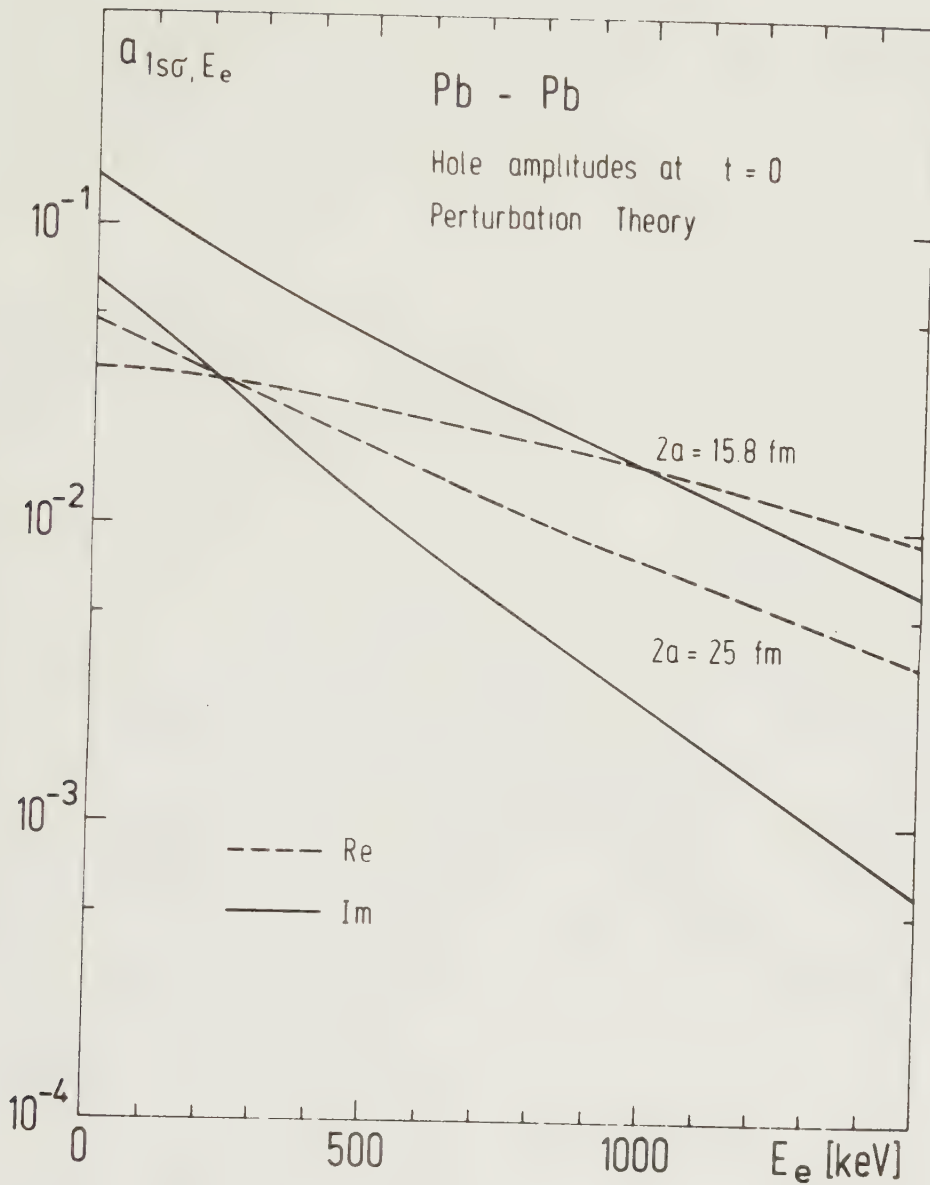


Abb. 17: Realteil (durchgezogen) und Imaginärteil (gestrichelt) der Ionisationsamplitude am Umkehrpunkt der Bahn ($t = 0$) im Pb-Pb-Stoß bei $b = 0$, berechnet für $2a = 15.8 \text{ fm}$ und $2a = 25 \text{ fm}$.

Positron amplitude $a_{E_e, E_p, 1s}^{(2)}$ Two step process

Pb-Pb , $2a=15.8 \text{ fm}$, $E_e=1.02$, $E_p=-1.7$

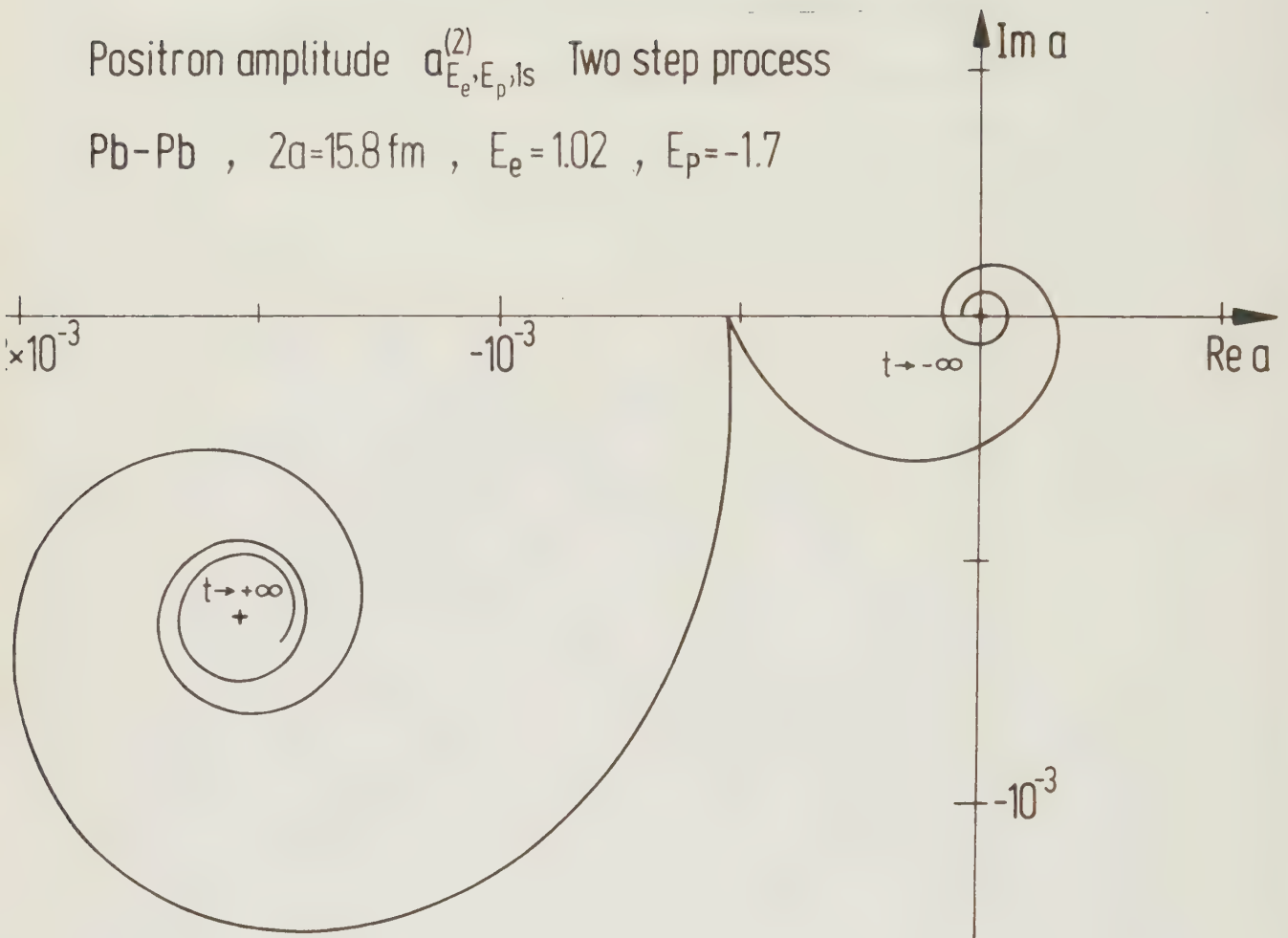


Abb. 18: Zeitabhängigkeit der komplexen Amplitude zweiter Ordnung für induzierte Erzeugung von Positronen aus der K-Schale. Wegen des Anwachsens der Lochamplitude ist die Symmetrie zwischen ein- und auslaufendem Ast der Bahn zerstört.

gen Ionisationsamplitude $a_{E_e E_p; 1s}^{(1)}(t)$ gewichtet wird, die sich erst während des Stoßes aufbaut, ist die Symmetrie bezüglich $t = 0$ zerstört. Der größere Anteil der Anregung resultiert vom auslaufenden Ast der Kernbewegung. Abb. 19 zeigt die Positronenwahrscheinlichkeit $|a_{E_e E_p; 1s}^{(2)}(t)|^2$ als Funktion der Stoßzeit (in Einheiten von $\hbar/mc^2 = 1.29 \cdot 10^{-21} \text{ sec}$) bzw. des Zweizentrenabstands. Die Anregung geschieht größtenteils in einem eng lokalisierten Bereich bis ca. 50 fm Kernabstand. Dies ist auf die hohe Übergangsfrequenz aber auch auf den steilen Anstieg der Kopplungsmatrixelemente bei kleinen R zurückzuführen.

Die asymptotische Amplitude $a(\infty)$ für den Zweistufenprozess ist nicht mehr rein imaginär, sondern nimmt einen komplexen Wert an, der einen Phasenwinkel $\Delta\phi_{1s}$ zur imaginären Achse einschließt. Dies ist wichtig, da die einzelnen Beiträge kohärent zu der positiv imaginären Amplitude des direkten Übergangs addiert werden müssen. Die Größe des Phasenwinkels

$\Delta\phi_n$ hängt von der Lage des Zwischenzustands n und den Kontinuumsenergien ab. Er wächst an (1) mit wachsender Elektronenenergie, (2) mit abnehmender (kinetischer) Positronenenergie und (3) mit wachsender Bindungsenergie. Ein simples analytisches Modell zur Lösung von (8) mit konstanten Energien bestätigte dieses Verhalten: Je mehr sich das Zwischen-niveau dem unteren Zustand nähert, desto größer wird $\Delta\phi_n$, desto destruktiver wird also die Interferenz. Abb. 20 illustriert dies für $s_{1/2}$ -Wellen (links) und $p_{1/2}$ -Wellen (rechts).

Aufgetragen sind die Amplituden $a_{1.2, -1.5}^{(1)}(\infty)$ für den direk-

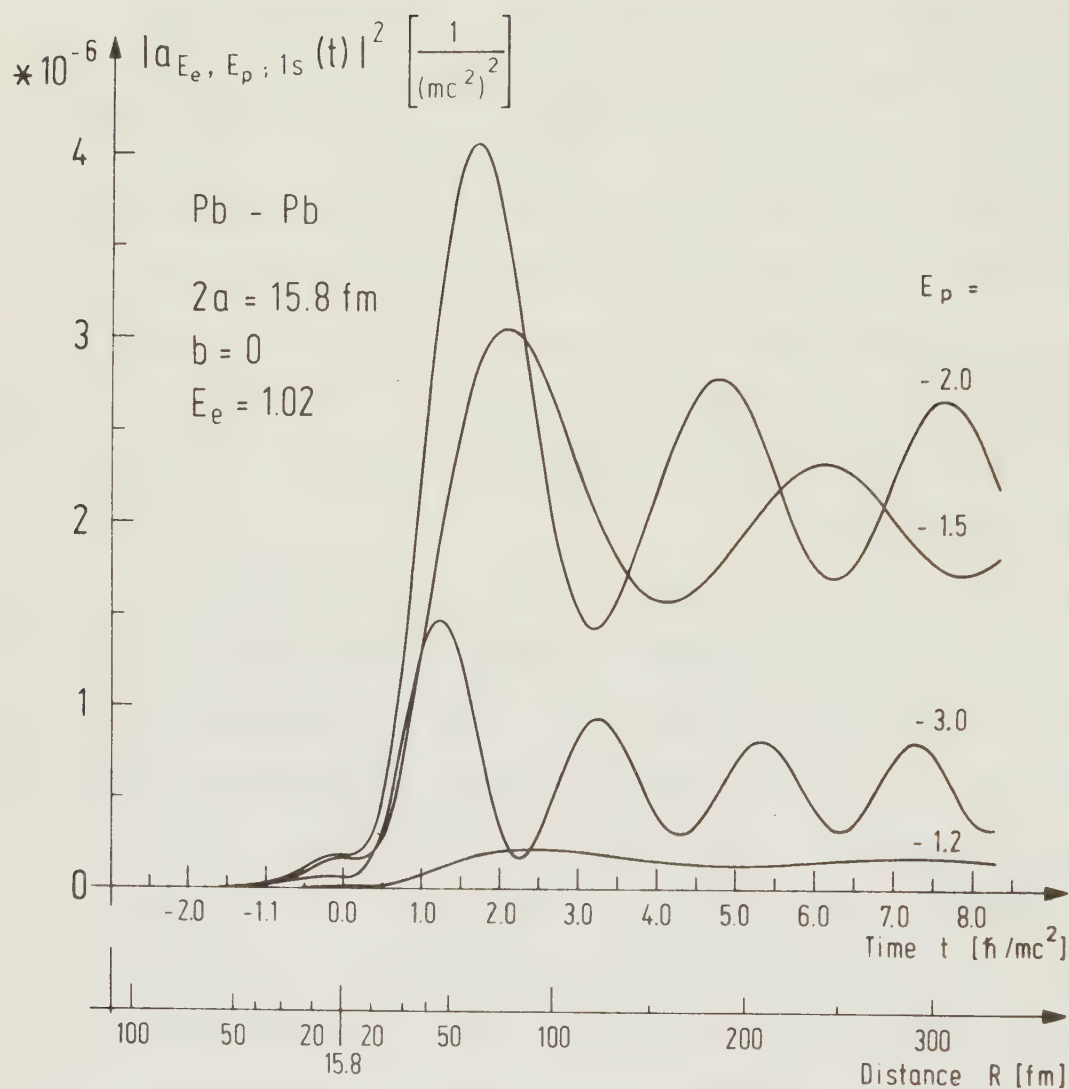


Abb. 19: Zeitabhängigkeit der Positronenwahrscheinlichkeit $|a_{E_e, E_p; 1s}(t)|^2$ aus dem $1s5$ -Niveau für verschiedene Positronenenergien bei festgehaltener Elektronenenergie $E_e = 1.02$.

Positron amplitudes

$$E_p = -1.5, E_e = 1.2$$

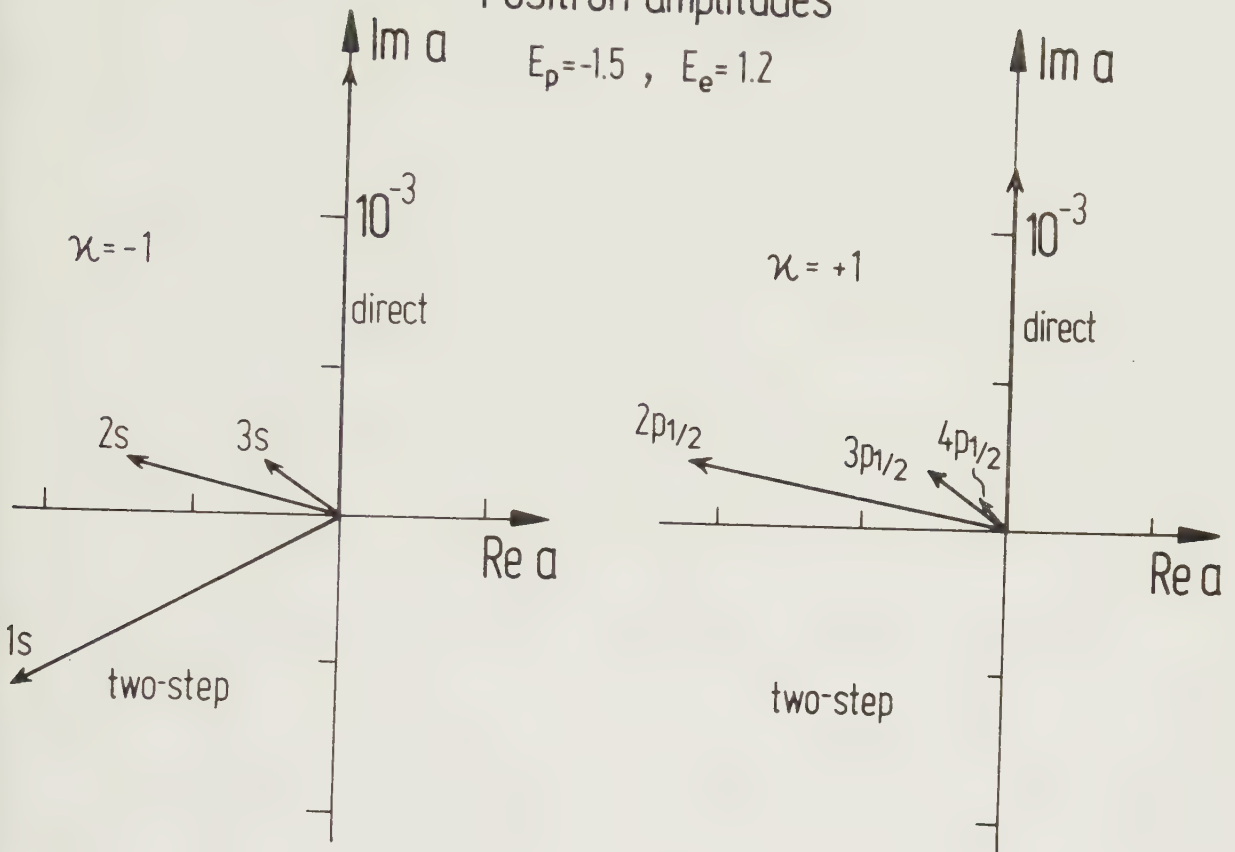


Abb. 20: Komplexe Endamplitude für direkte Paarerzeugung $a_{1.2,-1.5}^{(1)}$ und induzierte Positronenerzeugung $a_{1.2,-1.5;n}^{(2)}$ aus verschiedenen intermediären Zuständen. Links: $s_{1/2}$ -Wellen, Rechts: $p_{1/2}$ -Wellen. Die Einzelbeiträge müssen kohärent addiert werden.

ten Übergang und $a_{1.2,-1.5;n}^{(2)}(\infty)$ für den Zweistufenprozess aus den tiefsten gebundenen Niveaus.

Man sollte diese Darstellung allerdings nicht zu ernst nehmen, da die Kopplungen zwischen den einzelnen Basiszuständen nicht vernachlässigt werden dürfen, und diese sicher auch die Phasenwinkel verändern werden. In den gekoppelten-Kanal-Rechnungen des nächsten Kapitels sind alle diese Effekte enthalten, es ist jedoch keine so einfache Analyse mehr möglich.

In den folgenden Abbildungen werden einige der Ergebnisse zur Positronenerzeugung in unterkritischen Systemen dargestellt, berechnet jeweils durch Summation der direkten und Zweistufen-Paarerzeugungsamplituden aus 6 gebundenen Niveaus. Das Positronenspektrum lautet also

$$\frac{dP}{dE_p}(b) = \sum_{\lambda=\pm 1} 2|\lambda| \int_1^\infty dE_e \left| a_{E_e E_p}^{(1)} + \sum_n a_{E_e E_p;n}^{(2)} \right|^2 \quad (11)$$

mit dem Entartungsfaktor $2|\lambda| = 2j + 1$.

Abb. 21 zeigt dieses Spektrum für Pb-Pb - Stöße bei $2a = 16$ fm, variiert wird der Stoßparameter b . Das Spektrum hat die für Positronenerzeugung typische Gestalt mit einem Maximum bei 300 ... 400 keV und angenähert exponentiellen Abfall bei höheren Energien. Die Unterdrückung bei kleiner kinetischer Energie des emittierten Positrons war schon in den Kopplungsmatrixelementen zu beobachten und beruht auf der Coulombabstoßung der Wellenfunktion.

Der differentielle Erzeugungsquerschnitt in Fig. 22 folgt durch Integration über alle Stoßparameter b . Die Kurven wurden für verschiedene Werte von $2a$ berechnet und weisen auf einen steilen Anstieg des Querschnitts mit der Einschuß-

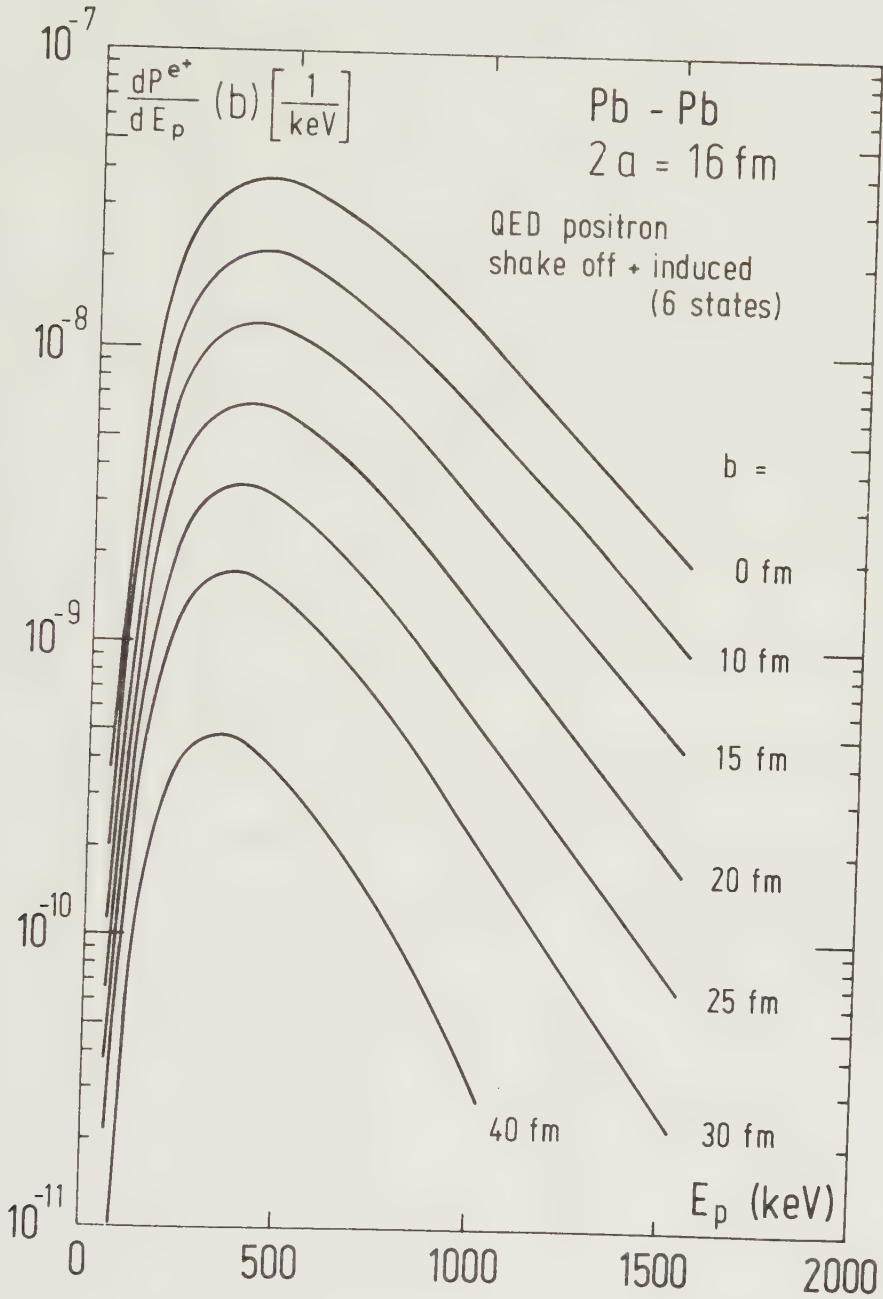


Abb. 21: Differentielle Positronen-Erzeugungswahrscheinlichkeit dP/dE_p , berechnet in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie für $2a = 16 \text{ fm}$ Pb-Pb-Stöße bei verschiedenen Stoßparametern.

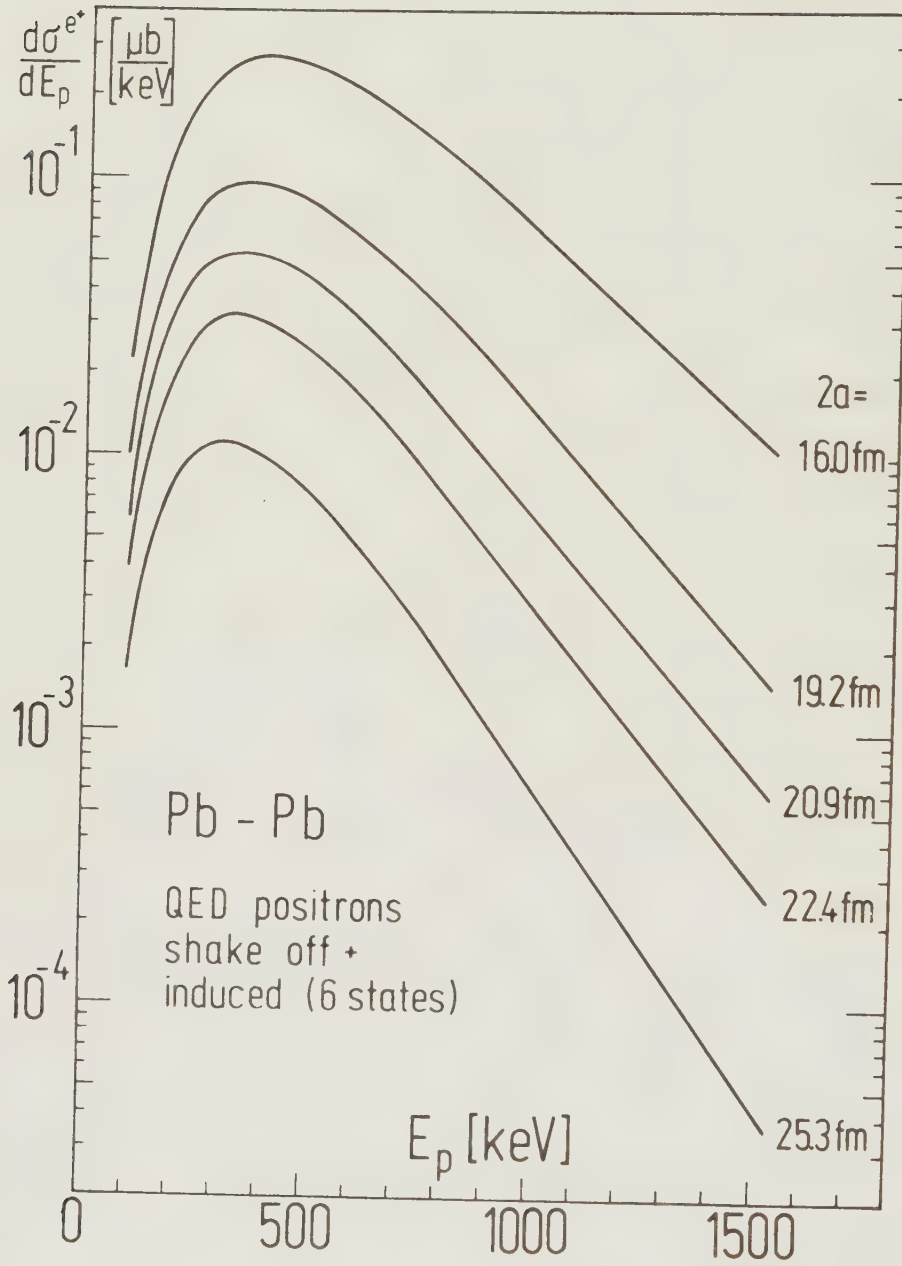


Abb. 22: Differentieller Positronenquerschnitt für Pb - Pb - bei verschiedenen Einschußenergien.

energie hin. Der exponentielle Abfall in Abb. 21, 22 wird im wesentlichen durch die Fourierzerlegung der Bahnbewegung bestimmt. Er wird daher steiler bei hohen Stoßparametern oder bei kleiner Einschußenergie.

Interessant ist weiterhin die Abhängigkeit vom Stoßparameter b , die in Fig. 23 für die Stoßsysteme Pb-Pb und Pb-U dargestellt ist. Da die Anregung hauptsächlich bei kleinen Kernabständen erfolgt (siehe Abb. 22), fällt die Wahrscheinlichkeit steil mit dem Stoßparameter ab. Das Abbiegen bei kleinen b hat kinematische Ursachen. Als Funktionen des Minimalabstands $R_{\min} = a (1 + \sqrt{1 + (b/a)^2})$ verlaufen die Kurven gerade. Die absoluten Wahrscheinlichkeiten sind mit Werten 10^{-4} zwar recht klein, jedoch durchaus im meßbaren Bereich.

Weitere differentielle und totale Querschnitte wurden in Ref. 106) veröffentlicht. Für einen Vergleich dieser Ergebnisse mit Rechnungen zum Untergrund durch nukleare Coulombanregung verweisen wir auf die Arbeit von Oberacker¹²¹⁾. Auf die vorliegenden experimentellen Resultate wollen wir erst im nächsten Kapitel eingehen, wenn die gekoppelten-Kanal-Rechnungen diskutiert werden.

Zum Abschluß soll noch der Anteil der einzelnen Beiträge in (11) aufgeschlüsselt werden. Dies ist aufschlußreich, auch wenn es keine direkte Möglichkeit gibt, diese Komponenten in einer Messung zu trennen. Zunächst zeigt Fig. 24 den Verlauf der Positronenwahrscheinlichkeit in Zentralstößen bei festgehaltenem Minimalabstand $2a = 20.9 \text{ fm}$ in Abhängigkeit von der Gesamtladung der Kerne. Sehr bemerkenswert ist der steile An-

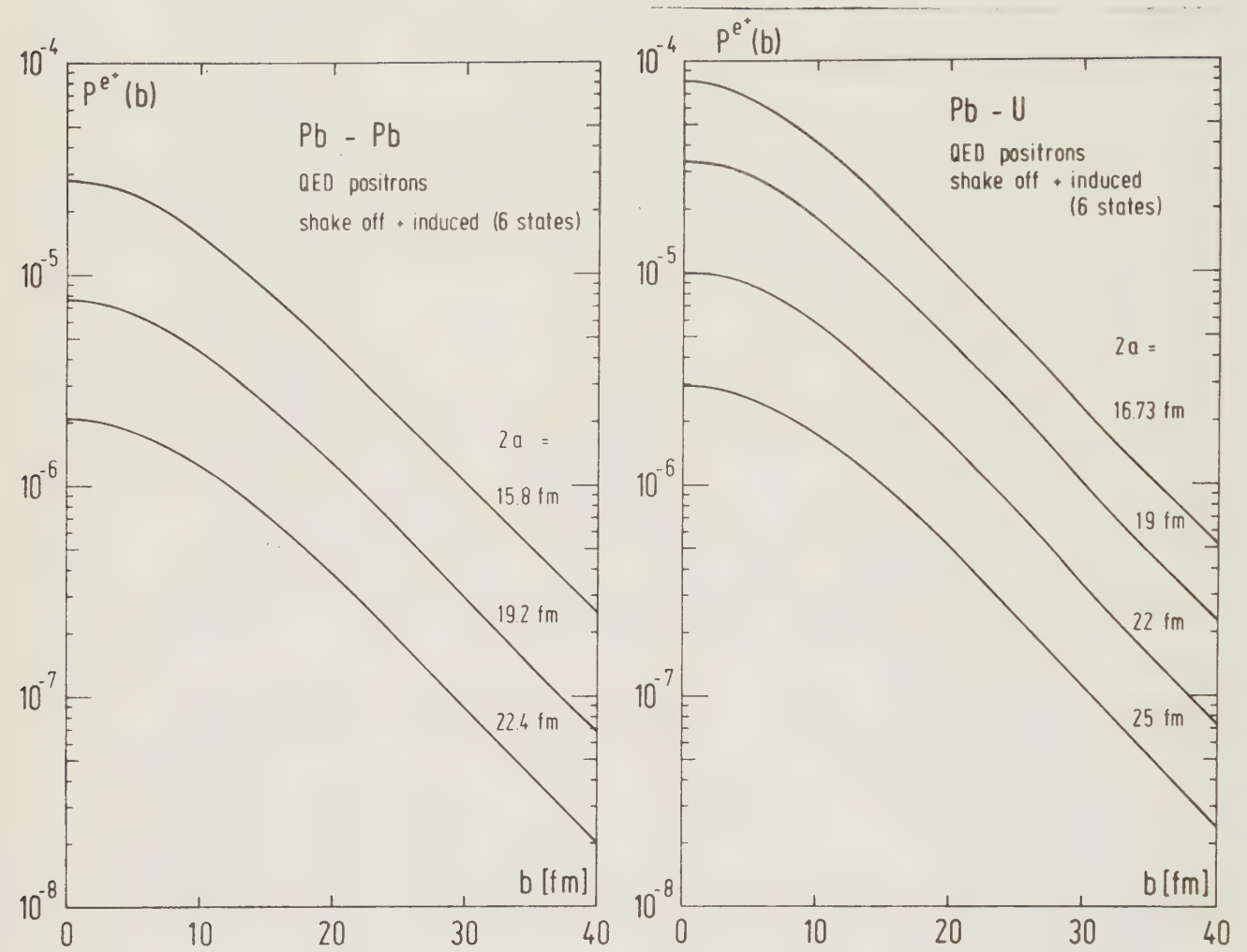


Abb. 23: Erzeugungswahrscheinlichkeit von Positronen in Abhängigkeit vom Stoßparameter für die Systeme Pb - Pb und Pb - U bei verschiedenen Einschußenergien.

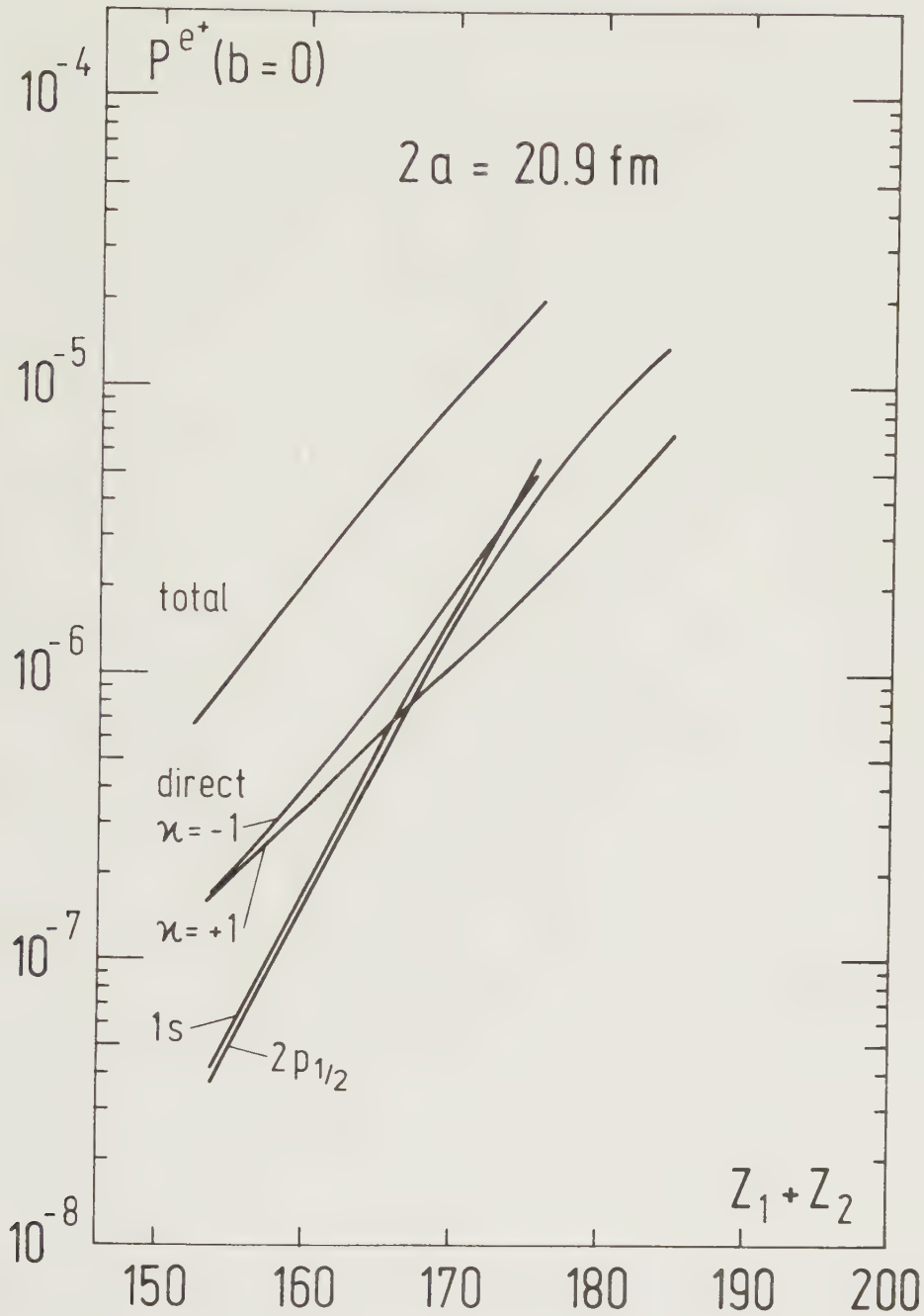


Abb. 24: Abhängigkeit verschiedener Beiträge zur quasimolekularen Positronenerzeugung in zentralen Stößen von der Kernladung $Z_1 + Z_2$. Der Minimalabstand $2a = 20.9 \text{ fm}$ wird festgehalten.

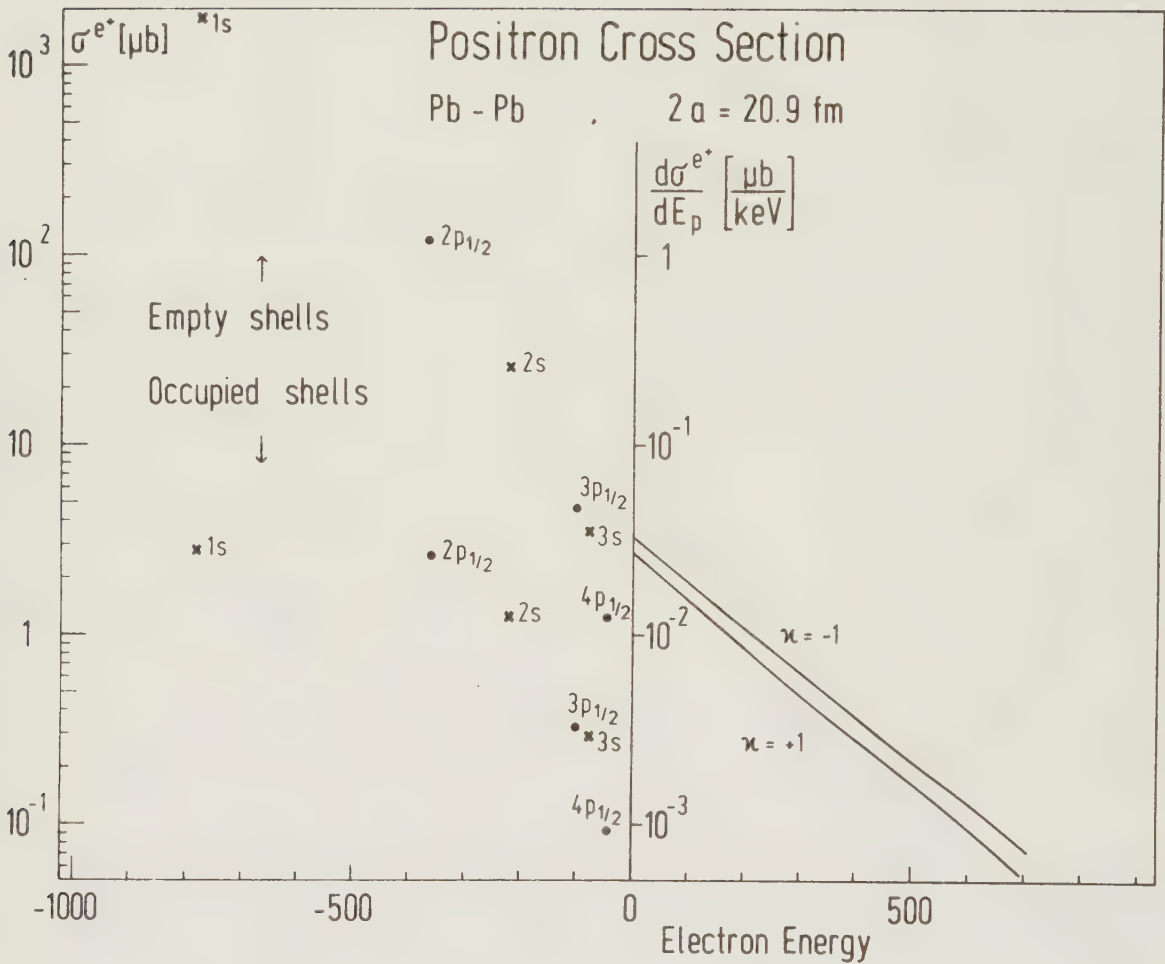


Abb. 25: Beiträge zum Erzeugungsquerschnitt im Pb-Pb-System mit $2a = 20.9 \text{ fm}$ aufgetragen über einer Energieskala. Linke Seite: Induzierte Erzeugung aus verschiedenen gebundenen Niveaus, die anfangs besetzt (unten) oder anfangs leer (oben) angenommen wurden. Rechte Seite: Direkte Paarerzeugung als Funktion der Elektronenenergie.

stieg mit Z , der in etwa einem Z^n -Verhalten mit $n \approx 23$ für die summierten Kurven entspricht. Hält man statt des Minimalabstands die Einschußenergie pro Nukleon konstant, so ist die Abhängigkeit etwas schwächer ($n \approx 18$ bei $E_{\text{lab}}/A = 5.9 \text{ MeV/u}$). Die Abb. 24 enthält weiterhin als Einzelbeiträge den direkten Übergang zwischen s-Wellen und zwischen p - Wellen und die induzierten Beiträge aus den $1s\sigma$ und $2p_{1/2}\sigma$ -Niveaus. Die beiden letzten zeigen einen besonders steilen Z -Anstieg. Im Bereich von $Z \sim 170$ übersteigen sie den erster-Ordnungs-Prozess der direkten Paarerzeugung. Dies zeigt noch einmal die Bedeutung der sich anbahnenden Änderung des Vakuumzustands mit der starken Kopplung zwischen dem tief gebundenen $1s\sigma$ ($2p_{1/2}\sigma$) Zustand und dem Positronenkontinuum.

Die Tabelle enthält die Wahrscheinlichkeit der Positronenemission $P^{e^+}(0)$ in Zentralstößen mit $Z = 154, 164, 174$ und 184 (für letzteres System nur die $p_{1/2}$ -Wellen) bei Einschußenergie 5.9 MeV/u . Verzeichnet sind die Beiträge der sechs berücksichtigten gebundenen Niveaus, der direkten Paarerzeugung sowie die kohärente Summe der Kanäle $\alpha = \pm 1$, und in der letzten Zeile zusätzlich der totale Querschnitt σ^{e^+} . Die Beiträge der gebundenen Niveaus beziehen sich auf den Zweistufenprozess, Gl. (8).

Noch etwas übersichtlicher ist vielleicht die Darstellung in Abb. 25. Sie enthält dieselbe Information wie die Tabelle, jedoch für den Positronenquerschnitt in Pb-Pb- Stößen bei $2a = 20.9 \text{ fm}$. Als Abszisse dient hier eine Energieskala. Rechts ist der differentielle Erzeugungsquerschnitt für die direkte Paarerzeugung als Funktion der kinetischen Elektronenenergie

Tabelle III: Positronenerzeugungswahrscheinlichkeit $P^{e^+}(0)$ in Störungstheorie, $E_{\text{lab}}/A \approx 5.9 \text{ MeV/u}$

	154	164	174	184
1s	4.59 (-7)	2.88 (-6)	2.05 (-5)	---
2s	2.07 (-7)	1.24 (-6)	4.77 (-6)	---
3s	5.94 (-8)	2.77 (-7)	1.36 (-6)	---
direkt	2.00 (-6)	5.61 (-6)	2.13 (-5)	---
Σ	4.89 (-6)	1.46 (-5)	4.47 (-5)	---
2p	4.11 (-7)	2.86 (-6)	1.73 (-5)	6.69 (-5)
3p	6.38 (-8)	3.15 (-7)	1.18 (-6)	4.24 (-6)
4p	2.05 (-8)	9.01 (-7)	3.20 (-7)	1.11 (-6)
direkt	2.00 (-6)	4.32 (-6)	9.60 (-6)	2.64 (-5)
Σ	4.35 (-6)	1.37 (-5)	3.99 (-5)	8.68 (-5)
total	9.24 (-6)	2.83 (-5)	8.45 (-5)	
$6e^+$	73.	197.	520.	

aufgetragen. Die linke Hälfte zeigt die induzierten Beiträge über der Bindungsenergie (im vereinigten Atom) des beitragenden gebundenen Niveaus. Der Anteil ist umso größer, je tiefer der Zwischenzustand gebunden ist, obwohl die Locherzeugungsrate besonders für die K-Schale stark absinkt gegenüber den höheren Niveaus.

Sehr interessant ist das Verhalten der induzierten Positronenerzeugung erster Ordnung $a_{n,E_p}^{(1)}$ in der oberen Kurve. Dies entspricht dem Stoß zweier nackter, völlig von der Elektronenhülle befreiter Kerne. Da die Notwendigkeit zur Locherzeugung

gung während des Stoßes entfällt, steigt die Positronenerzeugung um Größenordnungen an^(§). Der $1s\bar{\sigma}$ -Beitrag wird so groß, daß er alle übrigen Prozesse dominiert, insbesondere auch die direkte Paarerzeugung (shakeoff-Prozess). Dies zeigt, wie stark der am tiefsten gebundene Zustand mit dem Positronen-Kontinuum koppelt und gibt eine quantitative Rechtfertigung für die Bezeichnung "induzierter Zerfall des neutralen Vakuums".³²⁾

(§) Fußnote: Sollte nur einer der Stoßpartner vollständig ionisiert sein, so reduzieren sich die Werte um die Hälfte. Sie bleiben immer noch groß gegenüber dem Zweistufenprozess.

IX) Numerische Ergebnisse: Gekoppelte-Kanal-Rechnungen

1) Zur numerischen Methode

Die bisher vorliegenden störungstheoretischen Rechnungen zur Locherzeugung und Positronenproduktion in sehr schweren Stoßsystemen geben wertvolle Information über den Anregungsmechanismus. Steiler Abfall mit dem Stoßparameter, große Abhängigkeit von der Einschußenergie, δ -Elektronen-Spektren, die sich bis zu hohen Energien erstrecken und vor allem auch die unerwartet großen Anregungswahrscheinlichkeiten sind charakteristisch für die Ausbildung von quasimolekularen Zuständen und können ohne die massiven relativistischen Effekte in der Wellenfunktion des überschweren Systems nicht verstanden werden. Es ist sehr ermutigend, daß in den letzten Jahren viele der vorhergesagten Eigenschaften im Experiment bestätigt wurden. Gemessen wurden z. B. die Erzeugung von K-Löchern ¹²²⁾⁻¹²⁷⁾, δ -Elektronen ^{128), 129)} und Positronen ^{130), 131)} in einer Reihe von überschweren Stoßsystemen bis zu $Z = 188$, die meisten in zumindest qualitativer Übereinstimmung mit der Theorie.

Eine irritierende Diskrepanz bestand allerdings darin, daß die experimentellen Locherzeugungswahrscheinlichkeiten um einen Faktor von ca. 3...5 über den berechneten lagen, während das allgemeine Verhalten recht gut übereinstimmte. Im folgenden werden wir zeigen, daß sich diese Diskrepanz beseitigen läßt, wenn man von der störungstheoretischen Näherung zur vollständigen Lösung der gekoppelten-Kanal-Gleichungen übergeht, unter Beibehaltung des bisher verwendeten Modells

für die molekulare Basis. In der voll gekoppelten Theorie steigt die Lochrate um den genannten Faktor an und ist (mit Ausnahme des schwersten gemessenen Systems Pb-Cm ¹³²) in Übereinstimmung mit dem Experiment.

Die Notwendigkeit, über die Störungstheorie hinauszugehen, ergibt sich schon aus den hohen Anregungswahrscheinlichkeiten, die für die höheren Zustände mit 1 vergleichbar werden. Da die gebundenen Orbitale nicht nur mit dem Kontinuum, sondern auch untereinander stark koppeln, war eine Beeinflussung der Ionisation durchaus zu erwarten. Der hohe Anstieg beruht allerdings auf kohärenter Überlagerung verschiedener Vielstufenprozesse und läßt sich durch einfache Überlegungen kaum vorhersagen.

Die numerische Behandlung erfolgt sehr ähnlich zur Behandlung im letzten Kapitel. Da das Modell und speziell auch die in VIII.1 beschriebenen Näherungen beibehalten werden sollen, muß nur die Trapezintegration durch ein Verfahren zur Lösung des Satzes gekoppelter linearer Differentialgleichungen ersetzt werden. Es wurde ein Standardprogramm nach dem Hamming'schen modifizierten Prädiktor-Korrektor-Verfahren verwendet, die Unterteilung des Integrationsbereiches sowie die Zahl der Schritte wurden beibehalten. Da in jedem Schritt die volle Kopplungsmatrix zu bilden ist, benötigt dieses Verfahren allerdings wesentlich längere Rechenzeiten als die störungstheoretische Behandlung. So verbrauchte etwa eine einzelne Integration mit 25 Kanälen ca. 2 min Rechenzeit. Für eine Kurve $P^{e+}(b)$ sind mindestens 60 solcher Integrationen erforderlich. Dies erlegt dem Umfang numerischer Untersuchungen ge-

wisse Beschränkungen auf und könnte eine Grenze für den weiteren Ausbau des Modells setzen.

Eine Schwierigkeit ist die Behandlung der Kontinua im Rahmen der gekoppelten Kanäle. Der einfachste Weg besteht darin, das auftretende Integral in (II.12) durch eine Summe zu ersetzen:

$$\int_1^{\infty} dE \, a_{kE}(t) \, M_{lE} \, e^{-i(\chi_E - \chi_k)} \rightarrow \sum_i \Delta E_i \, a_{kE_i}(t) \, M_{lE_i} \, e^{-i(\chi_{E_i} - \chi_k)}$$

Die Diskretisierungsintervalle ΔE_i sind dabei so klein zu wählen, daß der Integrand in ihrem Bereich nicht oszilliert. Bezüglich der Phase bedeutet dies $\Delta \chi = \Delta E \Delta t / \hbar \ll \pi$. Nimmt man einen Bereich von $\Delta R = 300 \text{ fm}$ für die Anregung und eine Stoßgeschwindigkeit $v/c \approx .1$ an, so liefert diese Bedingung $\Delta E \ll 200 \text{ keV}$. Da numerische Rechnungen mit vertretbarem Aufwand bis zu ca. 20 Kontinuumszustände berücksichtigen können, läßt sich diese Bedingung zumindest im Bereich kleiner Energien erfüllen. Die obere Grenze der Summe wird durch die Fourierfrequenzen des Stoßes und durch die Energieabhängigkeit der Kopplungsmatrixelemente bestimmt. Siehe dazu auch IV.4.

Die Kopplung innerhalb des Kontinuums zeigt ein singuläres Verhalten bei Annäherung der Energien des Anfangs- und Endzustands. Sie ist als Hauptwertsingularität zu interpretieren:

$$\langle \varphi_E | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_E \rangle = P \frac{\langle \varphi_E | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_E \rangle}{E - E'} . \quad (1)$$

Für das besonders einfache Beispiel eines Kastenpotentials mit variabler Breite in der Schrödingergleichung wurde dies durch Einführung eines Konvergenzfaktors und nachfolgenden

Grenzübergang nachgeprüft. Gl. (1) sollte jedoch auch im vorliegenden Fall gültig sein.

Die Diskretisierung des Kontinuums-Integrals gilt selbstverständlich auch für die Formeln zur Teilchen- oder Locherzeugung im Vielelektronensystem. Die Beziehungen (II.18), (II.20) lauten nun

$$\sum_k a_{jk}^* a_{ik} \Delta_k = \frac{\delta_{ij}}{\Delta_i}, \quad \sum_k a_{kj}^* a_{ki} \Delta_k = \frac{\delta_{ij}}{\Delta_i} \quad (2)$$

mit dem Gewichtungsfaktor $\Delta_i = \Delta E_i$ im Kontinuum und $\Delta_i = 1$ für diskrete Zustände. Dies ist auch bei Festlegung der Anfangsbedingungen für die Integration zu beachten, die allgemein lauten

$$a_{ij}(-\infty) = \frac{\delta_{ij}}{\Delta_i}. \quad (3)$$

2) K-Loch-Erzeugung: Die Rolle der Mehrstufenanregungen

In diesem und den folgenden Abschnitten sollen die Ergebnisse der numerischen Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen diskutiert werden¹³³⁾. Zur Berechnung der Locherzeugung im Niveau i wurde dabei der unter Benutzung von (2) und (II.21) jeweils praktisch bequemste der äquivalenten Ausdrücke

$$\bar{N}_i = \sum_{j>F} |a_{ji}|^2 = \sum_{j>F} |a_{ij}|^2 = \Delta_i - \sum_{j<F} |a_{ij}|^2 \quad (4)$$

benutzt (die erste Umformung gilt nur für zeitsymmetrische Bahnbewegung!). Interessiert man sich nur für die Besetzung

eines bestimmten Niveaus, so genügt es also, nur eine numerische Integration durchzuführen. Die maximal erreichbare Information erhält man aus sovielen Integrationen, wie dem Maximum der Zahlen F und $(K-F)$ entspricht, wenn F die Anzahl der besetzten Zustände und K die Gesamtzahl der Kanäle ist.

Um die Auswirkung der Kanalkopplungen zu untersuchen, wurden Rechnungen zur K-Loch-Erzeugung im System Pb-Pb bei $2a = 20$ fm (4.65 MeV/u) und $b = 0$ durchgeführt. Dabei wurde die Zahl der berücksichtigten gebundenen Kanäle schrittweise erhöht. Das Ergebnis ist in der Tabelle dargestellt.

Tabelle IV: K-Loch-Wahrscheinlichkeiten $P_{1s}(0)$
für verschiedene Kanalzahlen

N	$F = N$	$F = 3$	$F = 2$	$F = 1$
1s	2.96%	-	-	-
2s	4.80%	-	-	19.92%
3s	6.84%	-	8.27%	21.40%
4s	8.08%	9.24%	10.61%	22.12%
6s	9.06%	11.00%	11.61%	22.56%
8s	9.42%	11.34%	12.03%	22.68%
Störungstheorie	2.84%			

Die verschiedenen Spalten wurden für unterschiedliche Positionen des Fermi-niveaus F gerechnet. F ist hier der höchste vor dem Stoß noch besetzte Zustand, N die Zahl der berücksichtigten Kanäle.

sichtigsten gebundenen Niveaus. Die linke Spalte ($F = N$) gibt also die reine Ionisation an, während in den anderen Spalten auch noch freie gebundene Zustände zur Verfügung stehen. Bemerkenswert ist der starke Anstieg der Lochwahrscheinlichkeit mit N . Dies bedeutet, daß Vielstufenprozesse sehr wichtig werden, in denen das Loch schrittweise über mehrere Zwischenzustände in die K-Schale transferiert wird. Es ist nicht möglich, die Anregung auf bestimmte Kaskaden zurückzuführen, da kohärente Überlagerungen eine große Rolle spielen.

Die letzte Zeile in der Tabelle läßt die Abhängigkeit von der Präparation des Stoßsystems erkennen. Entsprechend der Formel (III.16) steigt die Lochwahrscheinlichkeit monoton an mit der Zahl der freien Zustände. Am größten ist der Anstieg beim Übergang zur letzten Spalte, da der $2s\sigma$ -Zustand besonders stark mit dem $1s\sigma$ koppelt. Der Anstieg des gekoppelten-Kanal-Ergebnisses gegenüber der störungstheoretischen Ionisationsrechnung beträgt 3.3 für $F = N$ und 4.0 wenn die Zustände oberhalb des $3s$ frei sind.

Die Anfangsbesetzung ist nicht genau bekannt. Unter der extremen Annahme eines neutralen Systems, in dem alle Elektronen adiabatisch in den Grundzustand des Atoms $Z = 164$ übergehen, wären alle Niveaus bis zum $8s\sigma$ besetzt¹¹⁰⁾. Beim schnellen Durchgang durch das Target erreicht das Projektilteilchen einen mittleren Ionisations- und Anregungszustand. Nach dem groben Kriterium von Bohr¹³⁴⁾ werden alle Elektronen abgestreift, deren Bahngeschwindigkeit kleiner als die Ionengeschwindigkeit ist. Bei etwa 5 MeV/u Einschußenergie würde dies einer leeren $n = 5$ -Schale des Pb-Ions entsprechen.

Die Annahme, daß Löcher in der quasimolekularen $n = 4$ - Schale zur Verfügung stehen, sollte realistisch sein.

In den gezeigten Rechnungen wurden 16 miteinander koppelnde Kontinuumszustände eingeschlossen, mit einem kleinsten Diskretisierungsabstand von $\Delta E = 25 \text{ keV}$ und der Maximalenergie $E_e = 2 \text{ MeV}$. Die Rolle der Kontinuum-Kontinuum-Kopplung geht aus Abb. 26 hervor. Hier ist das Spektrum der ionisierten Elektronen (ohne Spin-Faktor 2) im Pb-Pb-System aufgetragen. Die untere Kurve wurde in Störungstheorie gerechnet, also $|a_{1ss, E_e}^{(1)}|^2$ und zeigt den typischen exponentiellen Abfall. Für die mittlere Kurve wurde zusätzlich die Kopplung zwischen den Kontinuumszuständen eingeschaltet. Offenbar bewirkt diese eine Verschiebung des Spektrums zu höherer kinetischer Elektronenenergie, während die gesamte Ionisationswahrscheinlichkeit unverändert bleibt. Bei zusätzlicher Einbeziehung der höheren ns -Niveaus (alle als leer angenommen) werden durch Mehrstufenanregung hauptsächlich Elektronen mit kleiner kinetischer Energie hinzugefügt. Das resultierende Spektrum (durchgezogene Linie) verläuft dadurch wieder exponentiell, liegt jedoch wesentlich höher als in der Störungstheorie.

Die Streuung der emittierten Elektronen zu höherer Energie läßt sich vielleicht in einem einfachen statischen Bild verstehen: Da das Elektron bei kleinem internuklearen Abstand erzeugt wird befindet es sich in einem stark bindenden Potential. Beim Auseinanderlaufen der Kerne wird das Potential schwächer, und die zugehörige Bindungsenergie kann freigesetzt werden. Ob diese Vorstellung zutrifft, müßte sich am Positronenspektrum feststellen lassen, welches dann zu kleineren kine-

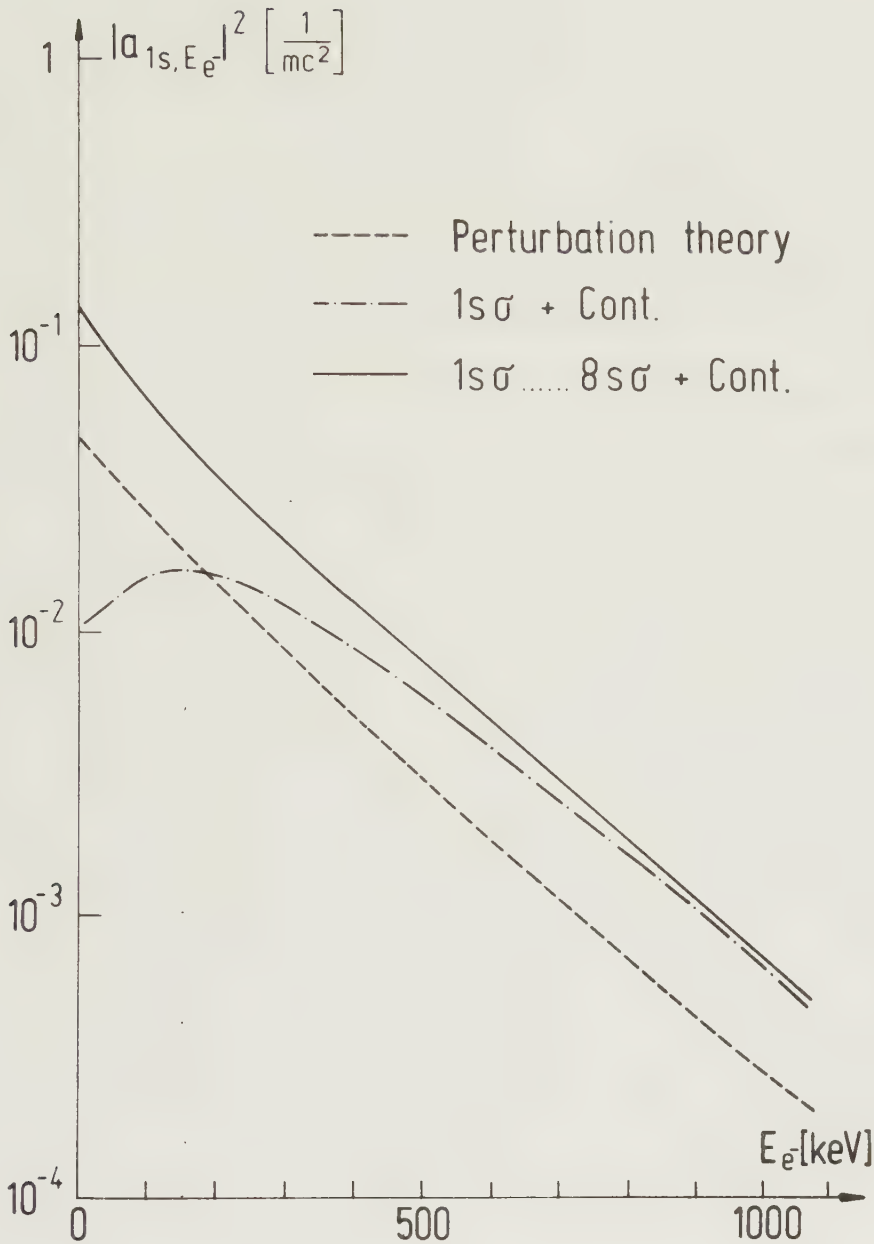


Abb. 26: Wahrscheinlichkeit der δ -Elektronen-Emission aus dem 1s σ -Orbital, berechnet in Störungstheorie (gestrichelt) und im gekoppelten-Kanal-Formalismus mit 8 gebundenen Zuständen (durchgezogen). Die strichpunktierete Kurve enthält nur das 1s σ -Niveau, berücksichtigt aber Kopplungen zwischen den Kontinuumszuständen.

tischen Energien, wenn auch in geringerem Ausmaß (da die Positronen bevorzugt in größerem Abstand vom Kern erzeugt werden), verschoben werden sollte. Wegen der Schwierigkeiten mit der Kopplung zwischen den Positronenzuständen (siehe IV.3) konnte dies bisher nicht untersucht werden.

Das Spektrum der erzeugten δ -Elektronen ist von Interesse, um experimentelle Informationen über die Wellenfunktionen des beinahe vereinigten atomaren Systems zu gewinnen, da der Abfall des Spektrums bei hohen Energien von deren hohen Impuls-komponenten abhängt. Wie wir sahen wird diese Analyse durch den Beitrag von Vielstufenprozessen erschwert. Es zeigt sich aber auch schon in Störungstheorie, daß die schwächer gebundenen Niveaus (insbesondere da $2p_{1/2}\sigma$) zur Emission hochenergetischer Elektronen stark beitragen¹⁰⁵⁾. Durch Koinzidenzmessung zwischen dem emittierten Elektron und einem charakteristischen Röntgenquant kann man sicherstellen, daß im gleichen Stoß ein Loch, etwa in der K-Schale, erzeugt wurde. Wegen der Anwesenheit vieler Elektronen und möglicher Mehrfachanregung läßt sich natürlich keine eindeutige Zuordnung zwischen Teilchen und Loch treffen. Zur Berechnung solcher Korrelationen dient Gl. (III.21). Das Ergebnis einer Rechnung, wieder am Beispiel des Pb-Pb-Systems bei $2a = 15.8$ fm, ist in Abb. 27 dargestellt. Die Fermikante wurde über den $3s\sigma$ -Zustand gelegt. Die obere Kurve zeigt die volle Koinzidenzwahrscheinlichkeit (pro Energieintervall), während in den beiden nächsten Kurven die Anteile aus Gl. (II.21) getrennt aufgetragen wurden. Offenbar ist der "statistische" Term $N_{Es\sigma} \cdot \bar{N}_{1s\sigma}$ bei kleinen Elektronenenergien dominant. Er fällt aber sehr steil

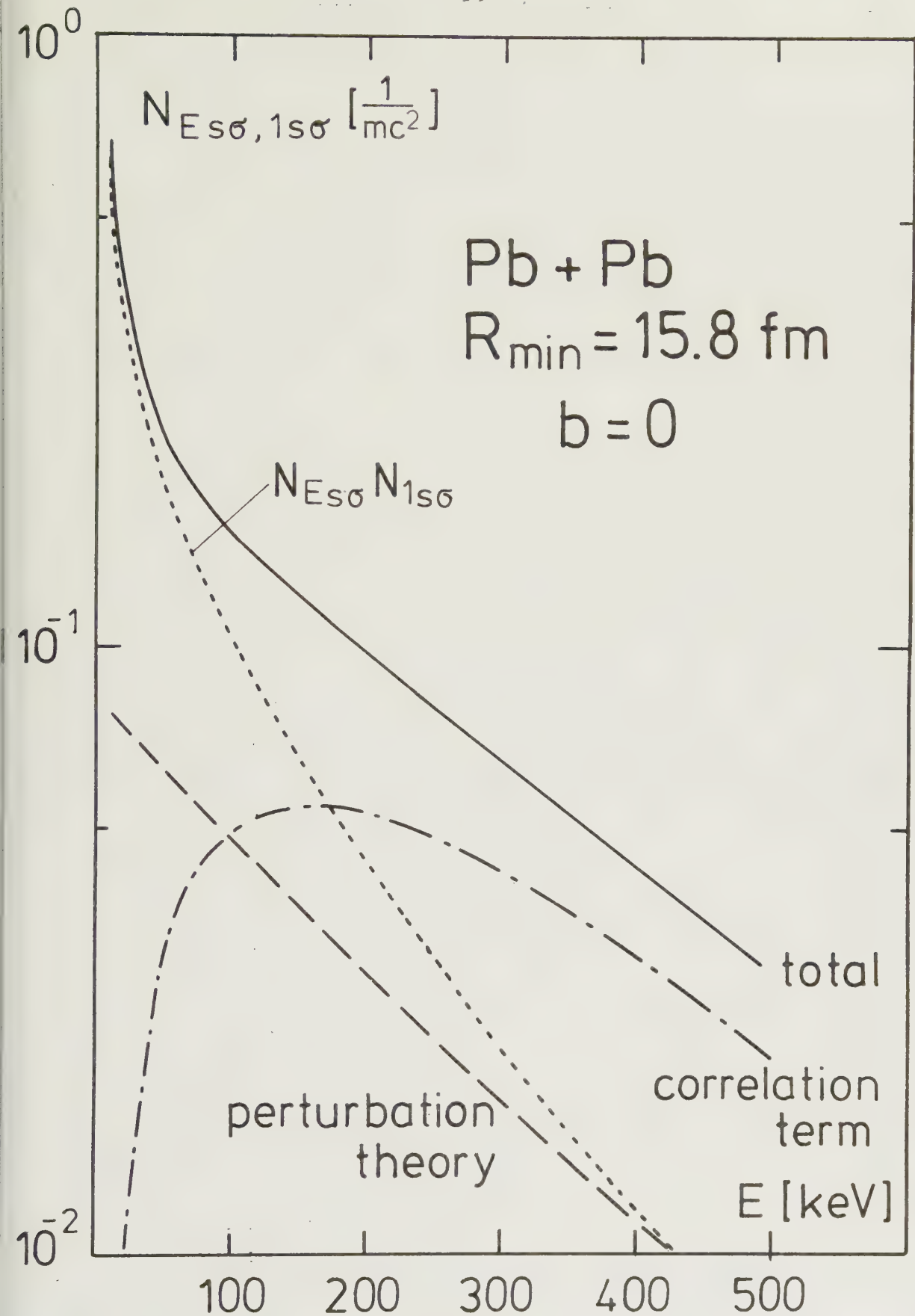


Abb. 27: Zahl der erzeugten γ -Elektron-K-Loch-Paare (nur ein Spin-Zustand) berechnet nach Gl. (III.21). Zusätzlich eingetragen sind die Beiträge des statistischen und des Korrelationsterms und das Resultat der Störungstheorie.¹³⁶⁾

ab, so daß im höheren Teil des Spektrums der "Korrelations-term" $\left| \sum_{r < F} a_{r, 1s\sigma}^* a_{r, 1s\sigma} \right|^2$ überwiegt. Nur dieser Term enthält zusätzliche Information, die über das Einzelspektrum hinausreicht. Wie in III.2 dargestellt, erhöht sich der statistische Beitrag noch, wenn man Koinzidenzen eines Lochs mit Elektronen des anderen Spin-Zustands oder aus hier nicht berücksichtigten anderen gebundenen Orbitalen (insbesondere den $np_{1/2}$) einbezieht.

Zum Abschluß der Diskussion der Locherzeugung soll noch eine mit dem Experiment vergleichbare Rechnung betrachtet werden¹³³⁾. Die bisher diskutierten Ergebnisse bezogen sich auf das Pb-Pb-System und dienten vornehmlich zur Illustration des Effekts der Mehrstufenanregung. Da in symmetrischen Systemen das $1s\sigma$ - und $2p_{1/2}$ -Orbital beide zur K-Schale der getrennten Atome korrelieren, ist hier eine Unterscheidung der Locherzeugung in diesen Zuständen nicht möglich. Bei asymmetrischen Systemen geht das $1s\sigma$ -Niveau in die K-Schale des schwereren und das $2p_{1/2}$ -Niveau in die des leichteren Atoms über, sodaß die Endzustände unterschieden werden können. Bei genügend großem $\Delta Z = Z_1 - Z_2$ sind die Übergänge zwischen beiden Niveaus vernachlässigbar oder können zumindest rechnerisch abgezogen werden ("vacancy-sharing"). Als Beispiel einer solchen Messung diene das System Xe-Pb mit $Z = 136$. Dieses System ist relativ leicht und beträchtlich asymmetrisch. Trotzdem soll die K-Anregung mit dem hier verwendeten Monopolmodell berechnet werden. Fig. 28 zeigt die Stoßparameterabhängigkeit der K-Loch-Erzeugung bei 4.6 MeV Einschußenergie pro Nukleon. Für die gekoppelte-Kanal-Rechnung wurde $F = 3s\sigma$

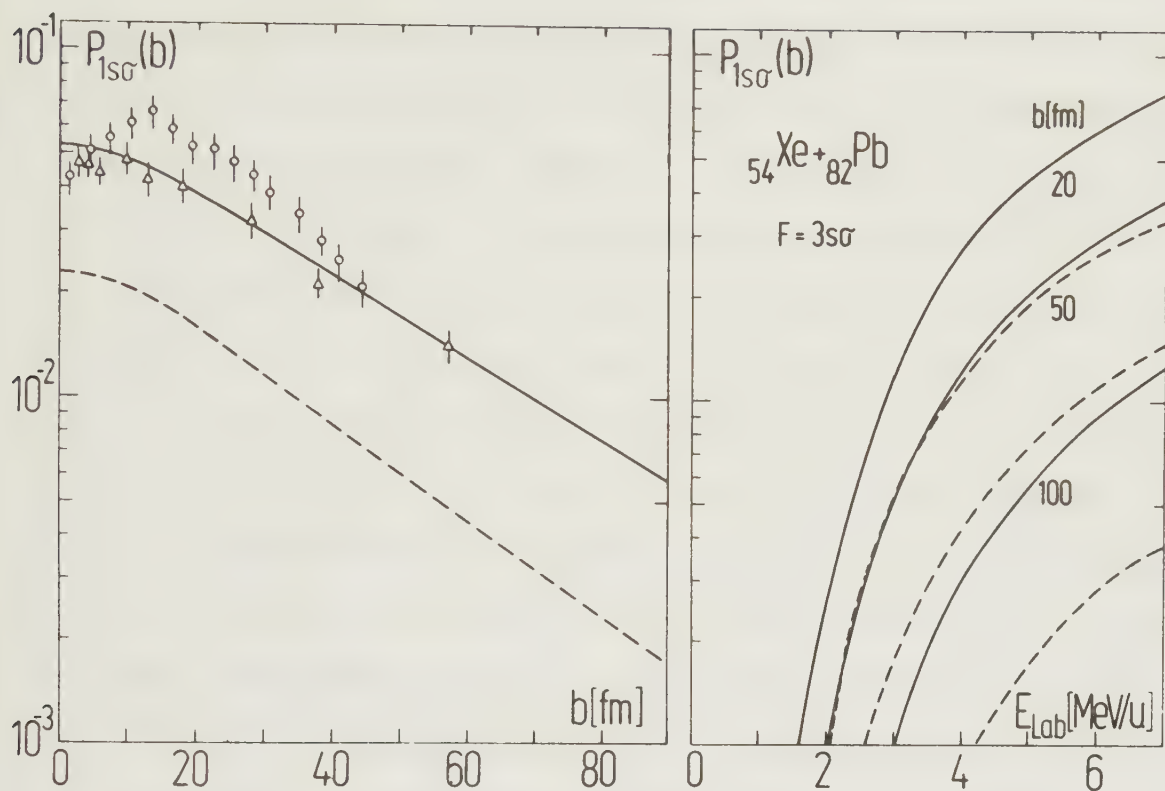


Abb. 28: Wahrscheinlichkeit der K-Loch-Erzeugung im System Xe-Pb, berechnet im gekoppelten-Kanal-Formalismus mit $F = 3s\sigma$ und in Störungstheorie (gestrichelt).

a) Stoßparameterabhängigkeit bei 4.6 MeV/u Einschüßenergie. Eingezeichnet sind experimentelle Punkte von Greenberg et al.¹²²⁾ (Kreise) und Anholt et al.¹²⁷⁾ (Dreiecke).

b) Anstieg von $P_{1s\sigma}(b)$ mit der Einschüßenergie.

angenommen, die gestrichelte Linie zeigt wieder das störungstheoretische Ergebnis. In Abb. 28b ist die Abhängigkeit von der Einschußenergie bei drei fixierten Stoßparametern dargestellt. Die experimentellen Daten in Abb. 28a stammen von Greenberg et al.¹²²⁾ (Kreise) und Anholt et al.¹²⁷⁾ (Dreiecke). Sie wurden mit einer Röntgen-Dopplerverschiebungs-Technik bzw. direkt durch Koinzidenzmessung gewonnen. Das Resultat der gekoppelten-Kanal-Rechnung gibt die Meßwerte sowohl im Verlauf wie in der absoluten Größe gut wieder. Das gilt auch für das sehr ähnliche Xe-Au-System, welches von Liesen et al.¹³²⁾ vermessen wurde. Nur bei größeren Stoßparametern ≥ 150 fm fällt die Theorie etwas zu steil ab. Auch wird das Maximum der Messung aus Ref. 122) nicht erklärt. In Rechnungen im Rahmen des Briggs-Modells (siehe II.2) wurde eine solche Struktur gefunden (Amundsen, Ref. 135) und auf kinematische Ursachen zurückgeführt (Reduktion der Geschwindigkeit bei nahen Stößen). Wegen der widersprüchlichen Experimente ist es gegenwärtig jedoch fraglich, ob dieser Effekt existiert.

Weitere numerische Ergebnisse zur Loch- und δ -Elektronenerzeugung finden sich in Refs. 133), 136). Hier soll nur noch darauf hingewiesen werden, daß durch die Effekte der gekoppelten Kanäle die Möglichkeiten zu einer Spektroskopie des $1s_5$ -Zustands erschwert werden. Die in Störungstheorie herleitbare Skalierungsregel geht von einem scharf definierten gebundenen Zustand aus. Die große Wichtigkeit der Vielstufenanregung besagt aber nichts anderes, als daß die Adiabasie der Basis stark verletzt wird. Ein Elektron aus der K-Schale wird dem

$1s\sigma$ -Orbital nur teilweise folgen und während des Stoßes zu einem beträchtlichen Anteil in höhere Niveaus gestreut werden. Die Lage des Anregungszustandes ist daher "im Mittel" nicht mehr mit dem $1s\sigma$ -Orbital identisch. Dieser Effekt äußert sich in der Vielstufenanregung und ist (soweit die Vollständigkeit der verwendeten Basis reicht) in den gekoppelten -Kanal-Rechnungen enthalten. Daher verlaufen die numerischen Ergebnisse als Funktion von b oder E_{lab} flacher als die Störungstheorie was einer geringeren Übergangsenergie entspricht.

Steigung und absolute Größe sind von der Lage der Fermikante F abhängig, sodaß die theoretischen Kurven einen gewissen "Fehlerbalken" tragen, wenn der Ladungs- und Anregungszustand im Eingangskanal nicht genau bekannt ist. Man sollte auch beachten, daß im gegenwärtigen Modell die höheren $ns\sigma$ -Zustände zur Ausschöpfung der Vollständigkeit notwendig sind, jedoch nicht sehr realistisch beschrieben werden. Wegen der Vernachlässigung der Abschirmung, des Multipolpotentials und wegen des Abschneidens der Kopplungen bei relativ kleinen Kernabständen kann man die hochliegenden Basiszustände wohl nicht mehr direkt mit bestimmten Niveaus im atomaren Limes ($R \rightarrow \infty$) identifizieren.

In Anbetracht der verschiedenen Näherungen ist es ermutigend, daß unser immer noch "überschaubares" Modell die Experimente gut beschreibt. Das Programm zu einer möglichen "Spektroskopie überschwerer Quasimoleküle" wird in diesem Rahmen darin bestehen, die Energien und Matrixelemente, welche in die gekoppelten-Kanal-Gleichungen eingehen, systematisch zu variieren,

um zu sehen, welche Werte mit dem Experiment verträglich sind. Inwieweit es dazu notwendig ist, die höher liegenden molekularen Orbitale besser zu beschreiben oder volle Zweizentren-Rechnungen durchzuführen, bleibt noch zu untersuchen.

3) Positronenerzeugung

In demselben Modell wie die Locherzeugung soll im folgenden auch die Erzeugung von Positronen in Schwerionenstößen untersucht werden. Es werden also die gekoppelten-Kanal-Gleichungen mit einer größeren Zahl gebundener $ns\sigma$ - oder $np\frac{1}{2}\sigma$ - Niveaus und dem oberen Kontinuum im Rahmen der Monopolnäherung gelöst. Wegen der schwachen Anregungen und da die Kopplungen innerhalb des unteren Kontinuums vernachlässigt werden sollen (vgl. IV.3) ist es am günstigsten, jeweils nur einen Positronenzustand mitzunehmen und für diesen nach Gl. (4) eine einzige Integration mit der Anfangsbedingung $a_{E_p, j}(-\infty) = \delta_{E_p, j} / \Delta E_p$ durchzuführen. Das untere Kontinuum wird also in Störungstheorie angekoppelt. Interessiert man sich für die Locherzeugung in gebundenen Niveaus, so ist eine getrennte Integration notwendig. Alle zur Positronenemission führenden Kopplungen sind in der Rechnung enthalten, also auch die in VIII.2 etwas mühsam zusammengefügteten direkten und induzierten Übergänge. Gleichzeitig werden die richtigen Lochraten verwendet.

Auf diese Weise wurden Rechnungen zur Positronenemission in unterkritischen und überkritischen Systemen durchgeführt. Für

letztere wurde das in Kap. VII entwickelte Projektionsverfahren mit den in VII.3 diskutierten Kopplungen $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_R \rangle$ und $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | H | \phi_R \rangle$ benutzt. Einige Resultate sind in den Tabellen V und VI dargestellt.

Tabelle V : Positronen-Wahrscheinlichkeit
 $p^{e^+}(0)$, $E_{lab}/A = 5.9 \text{ MeV/u}$

Z =

F	164	174	184	190
0	4.26 (-4)	2.37 (-3)	1.18 (-2)	2.83 (-2)
3	4.03 (-5)	1.40 (-4)	3.69 (-4)	5.62 (-4)
N	3.35 (-5)	1.05 (-4)	2.68 (-4)	4.08 (-4)
Störungs- theorie	2.8 (-5)	8.5 (-5)		

Tabelle VI : Totaler Positronen-Querschnitt
 $\sigma^{e^+} [\text{mb}]$, $E_{lab} = 5.9 \text{ MeV/u}$

Z =

F	164	174	184	190
0	4.5	24.	120.	300.
3	.27	.87	2.2	3.4
N	.22	.63	1.55	2.4
Störungs- theorie	.20	.52		

Tabelle V enthält die Positronen-Emissionswahrscheinlichkeit $P(0)$ für die vier Systeme Pb-Pb, Pb-U, U-U und U-Cf in zentralen Stößen. Alle Angaben beziehen sich auf die Einschußenergie 5.9 MeV/u. Eingetragen sind die Ergebnisse der gekoppelten-Kanal-Rechnung für drei verschiedene Positionen der Fermikante ($F = 0$: nackte Kerne, $F = 3$: alle Niveaus bis $3s_{1/2}$ und $4p_{3/2}$ einschließlich besetzt, $F = N$: alle in der Rechnung berücksichtigten gebundenen Niveaus besetzt) sowie zum Vergleich das Ergebnis der Störungstheorie erster und zweiter Ordnung aus Kap. VII. Tabelle VI enthält analog die totalen Querschnitte für Positronenemission in mb.^(§) In allen Rechnungen wurden $\lambda = -1$ Zustände bis zum $8s_{1/2}$ und $\lambda = +1$ Zustände bis zum $7p_{3/2}$ berücksichtigt. Die Beiträge der beiden Drehimpulse sind nahezu gleich groß, unabhängig von den speziellen Parametern des Stoßes.

Die gezeigten Ergebnisse bestätigen im wesentlichen die Beobachtungen aus Kap. VII.2. Besonders wichtig ist der steile Anstieg mit Z . Allerdings deutet sich im schwersten System (U-Cf) eine Abschwächung dieses Trends an, die Z -Abhängigkeit wird flacher als in den unterkritischen Stoßsystemen. Ebenso bedeutsam sind die sehr großen Werte für $F = 0$, die auf den dominanten Beitrag der induzierten und spontanen Positronenerzeugung aus der K-Schale zurückzuführen sind.

Um die Beiträge einzelner Übergänge zum Ergebnis etwas nä-

(§) Fußnote: Aus Rechenzeitgründen konnte nur bei wenigen Stoßparameterwerten gerechnet werden, daher sind die totalen Querschnitte numerisch ungenauer.

her zu untersuchen wurden Proberechnungen mit partieller Abschaltung einzelner Kopplungen durchgeführt. In der nachfolgenden Aufzählung finden sich die resultierenden Positronenwahrscheinlichkeiten $P^{e+}(0)$ für einige dieser Fälle. Die Rechnungen beziehen sich wieder auf Pb-Pb ($Z = 164$)-Stöße bei $b = 0$, $2a = 15.8$ fm und mit $F = 356$. Es wurden nur $s6^-$ -Zustände berücksichtigt.

- (a) $2.1 \cdot 10^{-5}$: voll gekoppelte Rechnung für die s -Zustände;
- (b) $3.59 \cdot 10^{-6}$: Nur der $1s$ -Zustand (anfänglich besetzt) ist berücksichtigt. Das entspricht im wesentlichen dem Zweistufenprozess $|a_{E_e, E_p; 1s}^{(2)}|^2$ aus Kap. VIII;
- (c) $1.03 \cdot 10^{-5}$: Beitrag aus dem $1s6$ -Niveau, dieses jedoch voll gekoppelt an die höheren Niveaus wie in (a). Die Erhöhung der Lochrate wirkt sich also auch stark auf die induzierte Positronenerzeugung aus;
- (d) $1.43 \cdot 10^{-5}$: Voll gekoppelte Rechnung, jedoch ohne den $1s6$ -Zustand;
- (e) $6.46 \cdot 10^{-6}$: Nur direkte Übergänge zwischen Elektronen- und Positronen-Kontinuum;
- (f) $5.79 \cdot 10^{-6}$: wie (e), jedoch mit Ankopplung der gebundenen Zustände ans obere Kontinuum;
- (g) $2.82 \cdot 10^{-5}$: Voll gekoppelte Rechnung wie (a). Alle Bindungsenergien wurden um 20 % vermindert;
- (h) $7.5 \cdot 10^{-6}$: Voll gekoppelte Rechnung unter Verwendung der bei $g = 30$ fm festgehaltenen Basis (vgl. VI. 4). Diese Methode liefert also eine viel zu kleine Positronenrate.

In der gekoppelten-Kanal-Rechnung überwiegt also infolge der erhöhten Lochwahrscheinlichkeit auch im Pb-Pb-System der Beitrag aus dem 1s-Niveau (c). Berücksichtigung von Abschirmung (g) kann die Positronenerzeugung erhöhen, zumindest, wenn man nur die Bindungsenergien und nicht die Matrixelemente modifiziert. Der Effekt ist allerdings weniger ausgeprägt als bei den Ionisationswahrscheinlichkeiten.

Bei überkritischen Systemen hat man aber auch zu beachten, daß sich durch die Abschirmung der kritische Abstand R_{cr} verringert. In Ref. 137) wurde durch Hartree-Fock-Slater-Rechnungen in der Monopolnäherung z. B. für U-U eine Verminderung von $R_{cr} = 32.5$ fm (nackte Kerne) auf $R_{cr} = 26$ fm (neutrales System) gefunden. Entsprechend stark reduziert sich die spontane Emissionsbreite für Positronen. Alle im folgenden diskutierten Ergebnisse wurden ohne Abschirmung erhalten.

Die berechneten Positronenspektren $dP(0)/dE_p$ für die vier Stoßsysteme sind in Abb. 29 eingezeichnet. Offenbar bleibt die Form der Spektren gegenüber der störungstheoretischen Rechnung unverändert. Der exponentielle Abfall bei hohen Energien ist in allen Fällen gleich, da bei gleicher Einschußgeschwindigkeit gerechnet wurde. Auch in den überkritischen Systemen tritt keine bemerkenswerte Struktur auf.

Abb. 30 zeigt die Stoßparameterabhängigkeit der Positronenwahrscheinlichkeit P^{O^+} und zwar sowohl für die Standardwahl der Fermikante, $F = 3$ (Abb. 30a), als auch für den Stoß vollständig nackter Kerne, $F = 0$ (Abb. 30b). Besonders interessant sind die Werte in Abb. 30b. Da hier der 1s σ -Zustand als

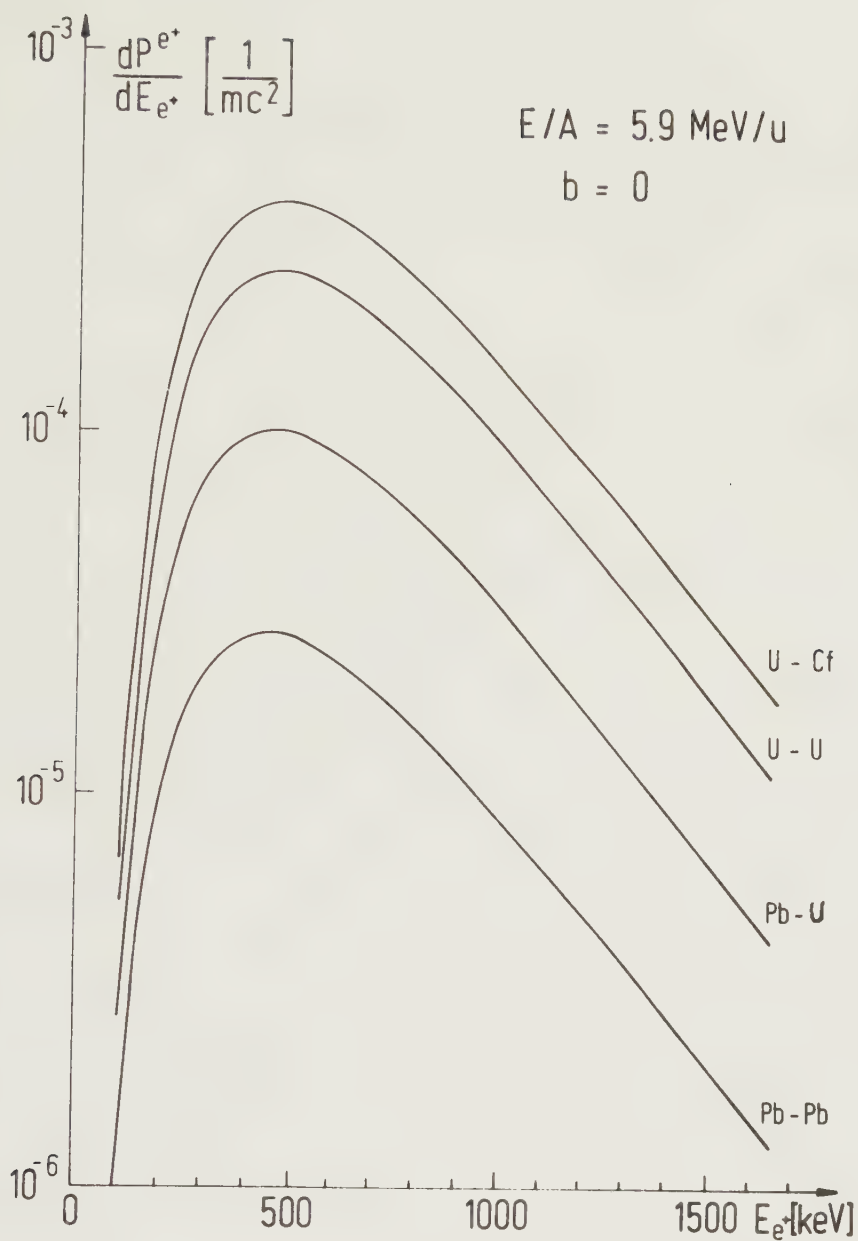


Abb. 29: Positronenspektren dP / dE_p für zentrale Stöße der Systeme Pb - Pb, Pb - U, U - U und U - Cf bei 5.9 MeV/u Einschussenergie. Gekoppelte-Kanal-Rechnung. Fermikannte $F = 3s6, 4p126$.

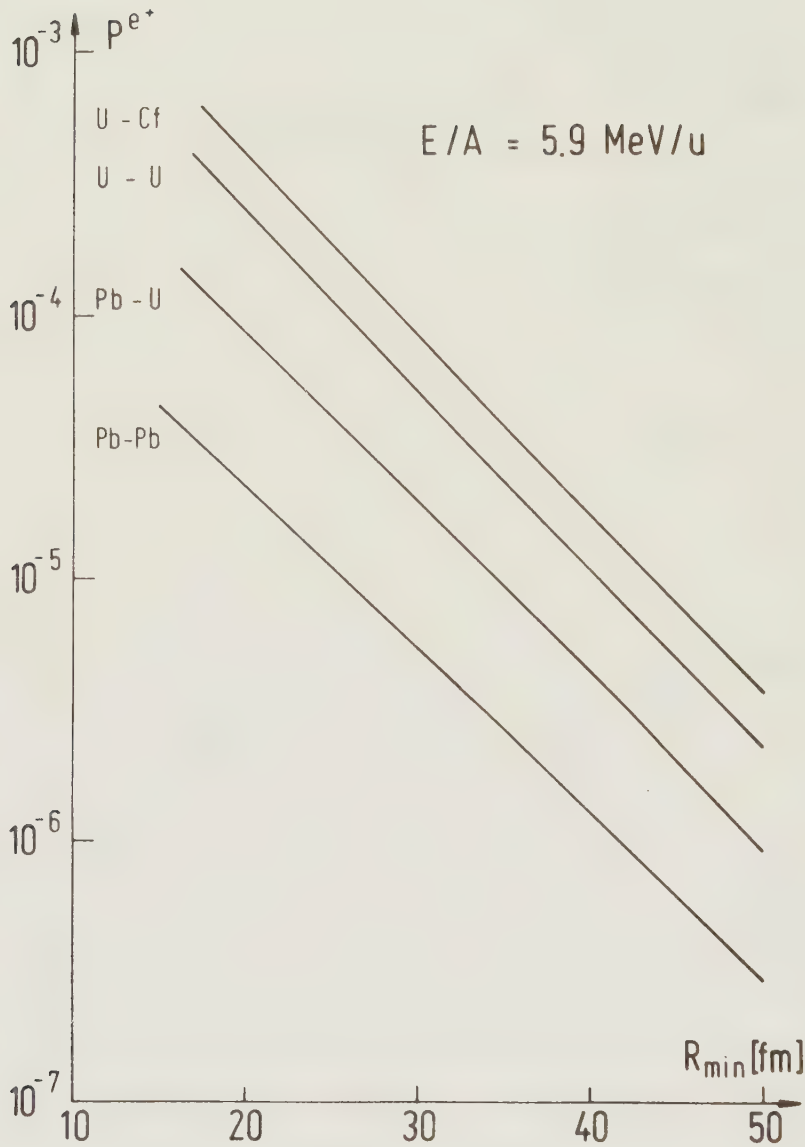


Abb. 30a: Positronenwahrscheinlichkeit als Funktion des Minimalabstands der Kerne bei fester Einschußenergie 5.9 MeV/u. Gekoppelte-Kanal-Rechnung mit der Fermikannte $F = 3s\epsilon$, $4p\frac{1}{2}\epsilon$ wie in den anderen Abbildungen.

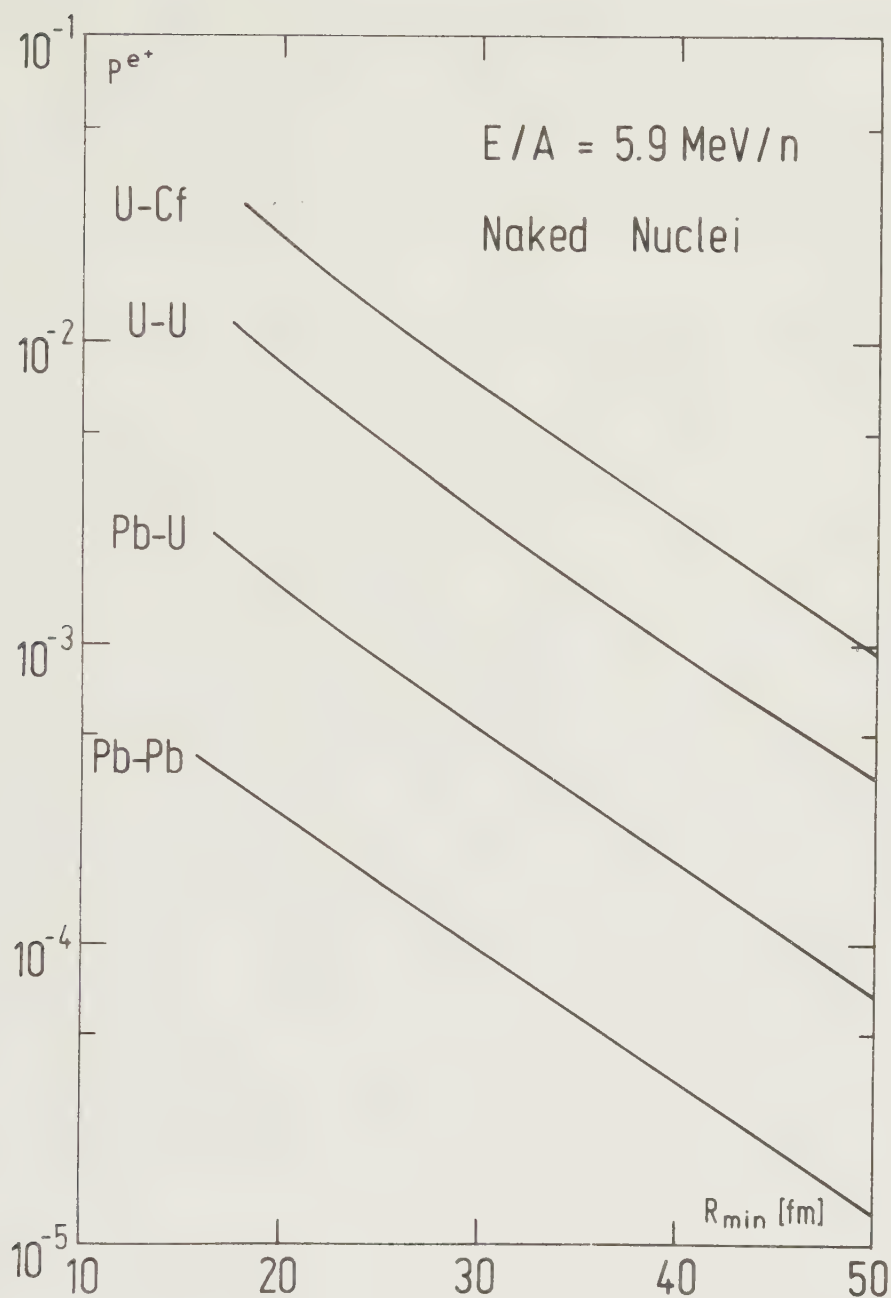


Abb. 30b: Wie Abb. 30a, jedoch berechnet für den Stoß nackter Kerne ($F = 0$).

leer angenommen wurde, steigt die Positronenwahrscheinlichkeit bis in den Prozentbereich. Wegen der geringen zu übertragenden Energie ist der Stoßparameterabfall wesentlich flacher als in Abb. 30a. Sehr bemerkenswert ist die extreme Z-Abhängigkeit, die bis zu Z^{30} (bei festgehaltener Einschußgeschwindigkeit!) erreicht.

Um das Resultat für die überkritischen Systeme etwas näher zu analysieren, wurde versuchsweise die "spontane" Kopplung $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | H | \phi_R \rangle$ in der Rechnung abgeschaltet. Das resultierende Positronenspektrum ist für U-U bei $2a = 16$ fm und U-Cf bei $2a = 17$ fm in Abb. 31 dargestellt. Aufgetragen ist das Ergebnis der gekoppelten-Kanal-Rechnung (nur der $\mathcal{L} = -1$ Anteil) ohne spontane Kopplung (gestrichelt) und mit spontaner Kopplung (durchgezogen). Die Kurven weichen stark voneinander ab, im schwereren System ändert sich die Form des Spektrums drastisch. Das wirkt sich auch auf die resultierende Erzeugungswahrscheinlichkeit aus. Fig. 32 zeigt P^{e+} , linear aufgetragen als Funktion des Streuwinkels im Schwerpunktssystem. Wieder ist der $\mathcal{L} = -1$ Anteil mit und ohne spontane Kopplung aufgetragen. Im letzteren Fall wächst die Wahrscheinlichkeit bei nahen Stößen wesentlich langsamer an.

Der Befund aus Abb. 31 und 32 weist zunächst darauf hin, daß das verwendete Projektionsverfahren trotz der Probleme mit dem Abschneiden der Wellenfunktion gut geeignet ist zur dynamischen Beschreibung des Eintauchvorgangs. Die kohärente Überlagerung zweier Kopplungen, die einzeln völlig unterschiedliche Resultate liefern, führt zu Ergebnissen, welche sich

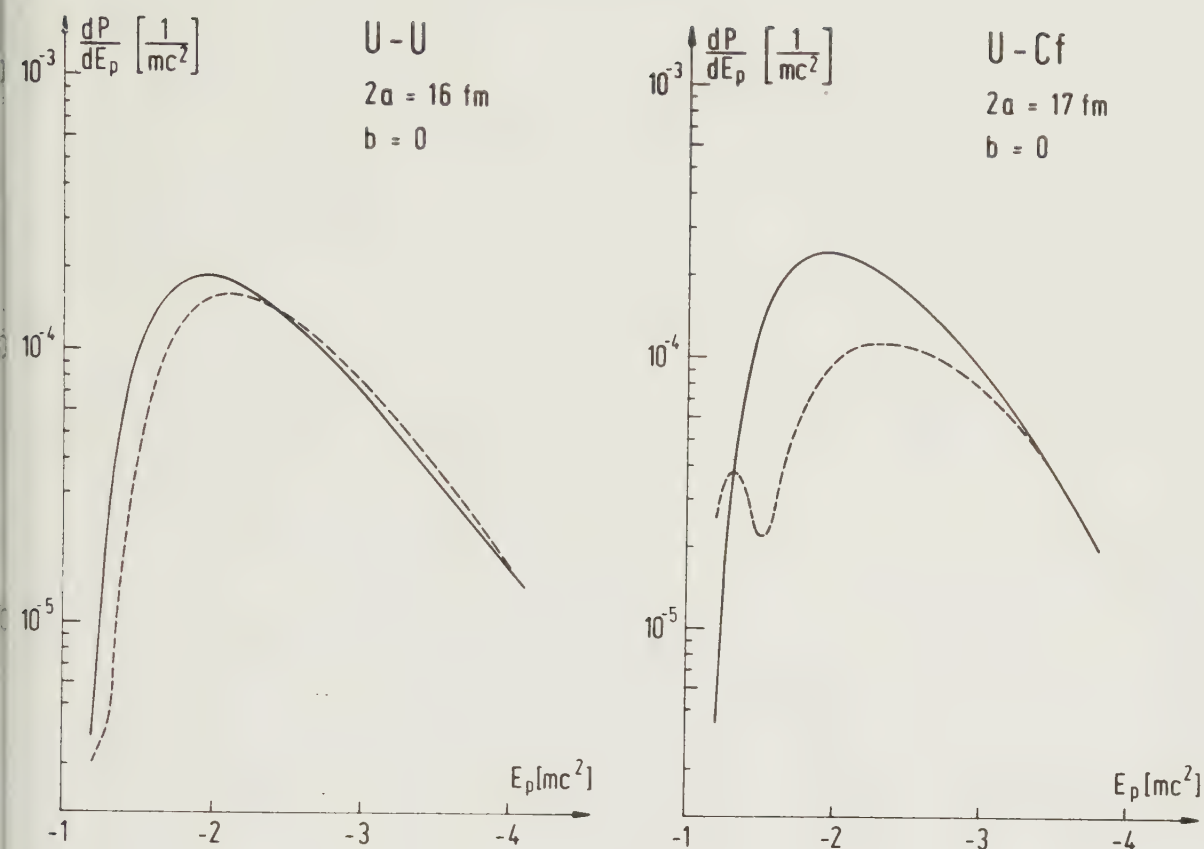


Abb. 31: Positronenspektren in den überkritischen Systemen U-U bei $2a = 16 \text{ fm}$ und U-Cf bei $2a = 17 \text{ fm}$. Durchgezogen: Volle gekoppelte-Kanal-Rechnung. Gestrichelt: Die "spontane" Kopplung wurde abgeschaltet. Nur der $\kappa = -1$ -Beitrag zum Spektrum ist gezeichnet.

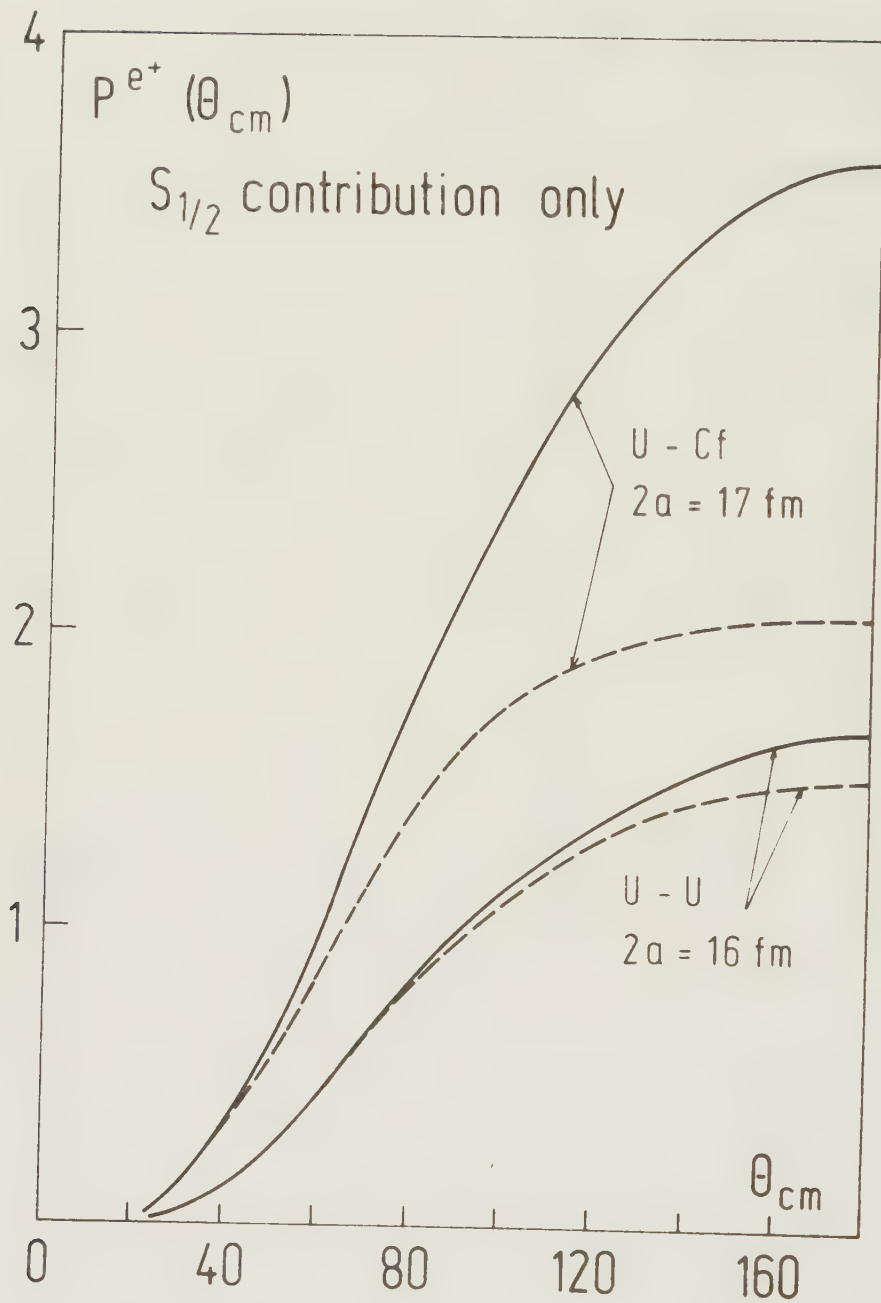
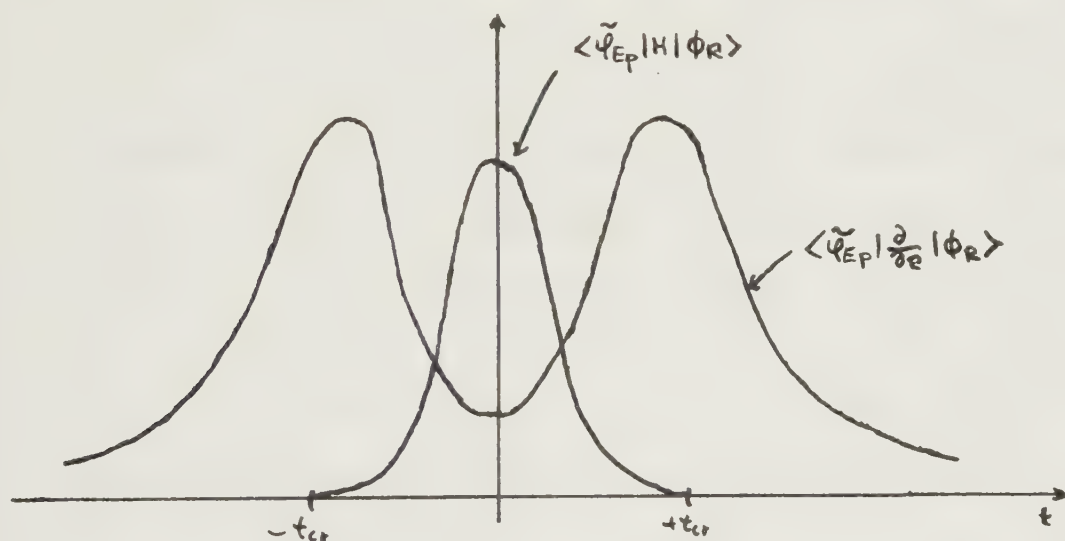


Abb. 32: Emissionswahrscheinlichkeit für Positronen als Funktion des Ionen-Streuwinkels. Bedeutung der Kurven wie in Abb. 32.

stetig in den Rahmen der unterkritischen Stöße einfügen (vgl. Abb. 29, 30). Leider heißt dies aber auch, daß sich wegen der Kürze der Stoßzeit keine qualitativen Effekte abzeichnen, die auf den Eintauchprozess hinweisen. Die Berücksichtigung der "spontanen" Kopplung ist zwar in der Rechnung unerlässlich. Da sich aber auch die "1s-induzierte" Kopplung gerade in dem Bereich verändert, wo $\langle \tilde{\psi}_{Ep} | H | \phi_R \rangle$ wirksam wird (siehe die Matrixelemente in Abb. 14, 15), ergänzen sich beide Beiträge derart, daß wieder ein normales Spektrum entsteht. Das Verhalten der Kopplungen ist in der untenstehenden Skizze nochmals schematisch dargestellt.



Die Untersuchung des Eintauchprozesses kann daher nur durch möglichst genaue quantitative Vergleiche zwischen Theorie und Experiment erfolgen. Positronen- und K-Loch-Erzeugung müssen dabei gleichzeitig betrachtet werden. Da der 1s $\bar{5}$ -Beitrag zur Positronenerzeugung offenbar sehr groß ist, sollten sich Abweichungen in Energien und Wellenfunktionen oder eine prinzipielle Abweichung vom Konzept des geladenen Vakuums in quan-

titativen Diskrepanzen äußern. Ein direktes Signal der spontanen Positronenerzeugung wird man aber wohl nur finden können, wenn es möglich sein wird, Stöße oberhalb der Coulombbarriere mit verlängerter Kontaktzeit der Kerne zu beobachten. Auf diese Weise kann der Beitrag der spontanen Kopplung selektiv verstärkt werden (siehe nächstes Kapitel).

4) Vergleich mit dem Experiment

In den letzten beiden Jahren wurden - hauptsächlich in der GSI (Darmstadt) - Experimente zur Positronenerzeugung in Stößen sehr schwerer Ionen bei Energien bis zur Coulombbarriere^{130), 131), 138)-140)} durchgeführt. Dabei wurden zwei verschiedene Versuchsanordnungen verwendet : Ein Solenoid -Spektrometer¹³⁰⁾ und ein Orangen- β -Spektrometer¹³¹⁾. Die Ergebnisse der Messungen sollen mit der Theorie verglichen werden und zwar jeweils unter Verwendung der gekoppelten-Kanal-Rechnungen, die sich zur Beschreibung der K-Loch-Erzeugung bewährt haben. Die Fermikante wurde über dem Niveau $F = 3$ angenommen, d. h. alle Zustände bis zum $3s_6$ und $4p_{\frac{1}{2}6}$ sind gefüllt.

Ein Hauptproblem bei der Auswertung der Experimente stellt der Untergrund durch Kernprozesse dar. Auch unterhalb der Coulombbarriere können die Kerne durch Coulombanregung stark angeregt werden. Treten beim Übergang in den Grundzustand Photonen mit Energien $> 2mc^2 = 1022 \text{ keV}$ auf, so können durch

Konversion Paare erzeugt werden. Auch wenn dieser Prozess erst lange (typisch 10^{-13} sec) nach dem Stoß geschieht, läßt sich der Beitrag experimentell normalerweise nicht von den "molekularen" Positronen unterscheiden^(§).

Der Untergrund ist stark von der Kernstruktur abhängig. Je nach deren Kenntnis ist es möglich, die Coulombanregung theoretisch zu berechnen und die resultierende Positronenausbeute mittels der bekannten nuklearen Konversionskoeffizienten¹⁴²⁾ zu deduzieren¹⁴³⁾. Im Stoß $^{208}\text{Pb} - ^{208}\text{Pb}$ kann dieses Verfahren mit guter Genauigkeit angewandt werden, da die Niveaustuktur des doppelt-magischen Bleikerns einfach und gut bekannt ist. In anderen Fällen greift man am besten zur direkten Messung des γ -Spektrums aus dem Stoß und faltet dieses mit dem Konversionskoeffizienten¹⁴⁴⁾. Dabei sind allerdings Annahmen über die Multipolarität der Übergänge notwendig. Monopolkonversion kann überhaupt nicht erfaßt werden. In Stößen "leichterer" Systeme, wo keine QED-Positronen auftreten, läßt sich dieses Verfahren testen und ist in Übereinstimmung mit den Messungen. Die nach dieser Methode vom Kern-Untergrund befreiten Meßdaten werden mit der Theorie verglichen.

Betrachten wir zunächst das Resultat einer differentiellen Messung mit dem Orangenspektrometer¹³¹⁾. Abb. 33 zeigt die differentielle Positronenwahrscheinlichkeit dP/dE_p als Funktion des Streuwinkels θ_{cm} . Es wurde ein Energiefenster von

(§) Fußnote: Eine Möglichkeit dazu wurde von Kaun et al.¹⁴¹⁾ vorgeschlagen, der die unterschiedliche Position im Kristallgitter während der Emission durch eine channeling-Methode ausnutzen will.

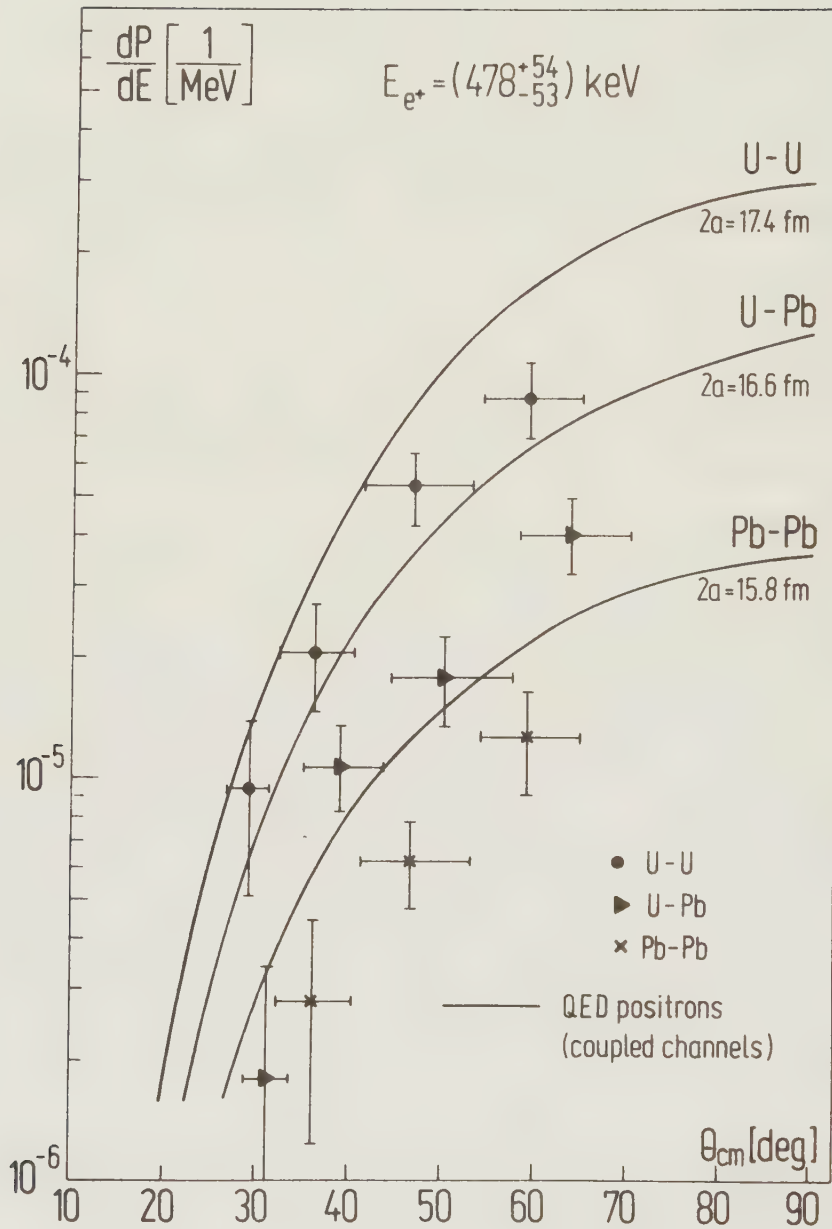


Abb. 33: Die differentielle Wahrscheinlichkeit der Positronenemission für die Systeme Pb-Pb, U-Pb und U-U bei 5.9 MeV/u. Gemessen wurde in einem engen Energiebereich um 478 keV bei verschiedenen Winkelfenstern des gestreuten Ions¹³¹).

ca. 100 keV Breite im Bereich des Maximums der Energieverteilung ausgeblendet. Untersucht wurden Pb-Pb, U-Pb und U-U-Stöße mit 5.9 MeV/u Einschußenergie pro Nukleon. Die horizontalen Balken geben die Breite der Winkelfenster an. Die Auftragung über Θ_{cm} erfolgt unter der Annahme, daß das Projektilteilchen beobachtet wird. Da experimentell zwischen den beiden stoßenden Kernen nicht unterschieden wird, wurde die theoretische Kurve symmetrisiert (siehe Anhang C). Der Anstieg der experimentellen Werte wird sehr gut wiedergegeben, jedoch liegt die Theorie deutlich zu hoch. Die Diskrepanz, die vom System weitgehend unabhängig ist, reicht bis zu einem Faktor zwei.

Etwas anders ist die Situation bei Meßdaten des Solenoid-Spektrometers^{130), 139)} in einem festen Winkelfester $\Theta_{lab} = 45^\circ \pm 10^\circ$, siehe Abb. 34. Die gesamte Positronenwahrscheinlichkeit ist über dem Minimalabstand der Kerne aufgetragen, variiert wird die Einschußenergie. Die Blei-Blei-Kurve stimmt nun sehr gut, für die schwereren Systeme liegt die Theorie wieder deutlich über dem Experiment. Da die gleichen Systeme wie in Abb. 33 gemessen wurden, könnten beide Experimente wohl nur konsistent sein unter der Annahme eines drastischen Unterschieds in der Form des Positronenspektrums (vgl. dazu aber den nächsten Absatz). Die gute Übereinstimmung im Pb-Pb-System wird noch einmal demonstriert in Fig. 35, wo eine Solenoid-Messung¹³⁰⁾ bei zwei Winkelfenstern dargestellt ist.

Betrachten wir zum Schluß die Resultate der neuesten, doppelt differentiellen Messungen¹²⁶⁾ des Energiespektrums in Koinzi-

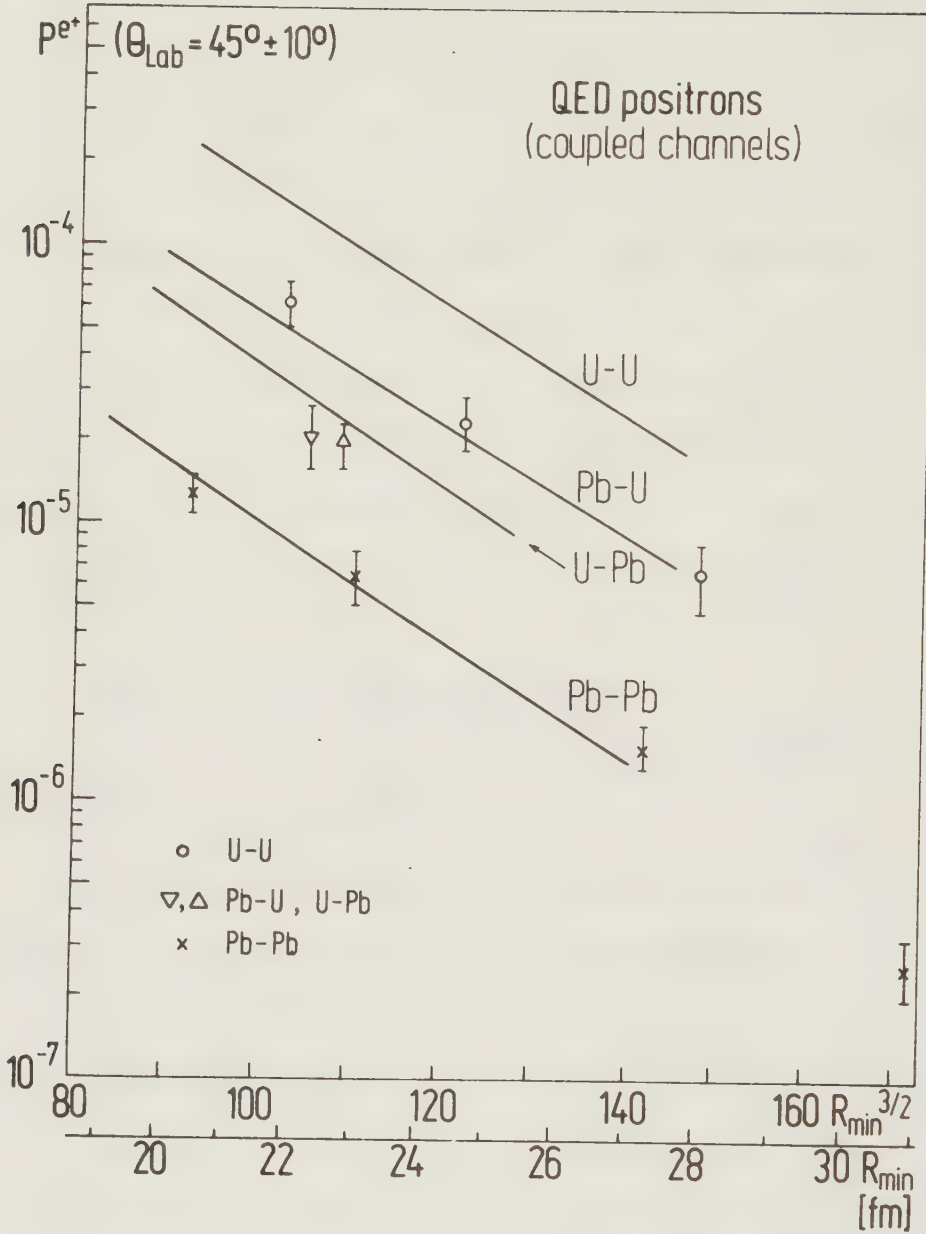


Abb. 34: Positronenwahrscheinlichkeit bei Streuung des Projektilions in den Winkelbereich $\theta_{\text{Lab}} = 45^\circ \pm 10^\circ$ als Funktion des minimalen Kernabstands. Variiert wird die Einschussenergie. Experimentelle Daten aus Ref. 139).

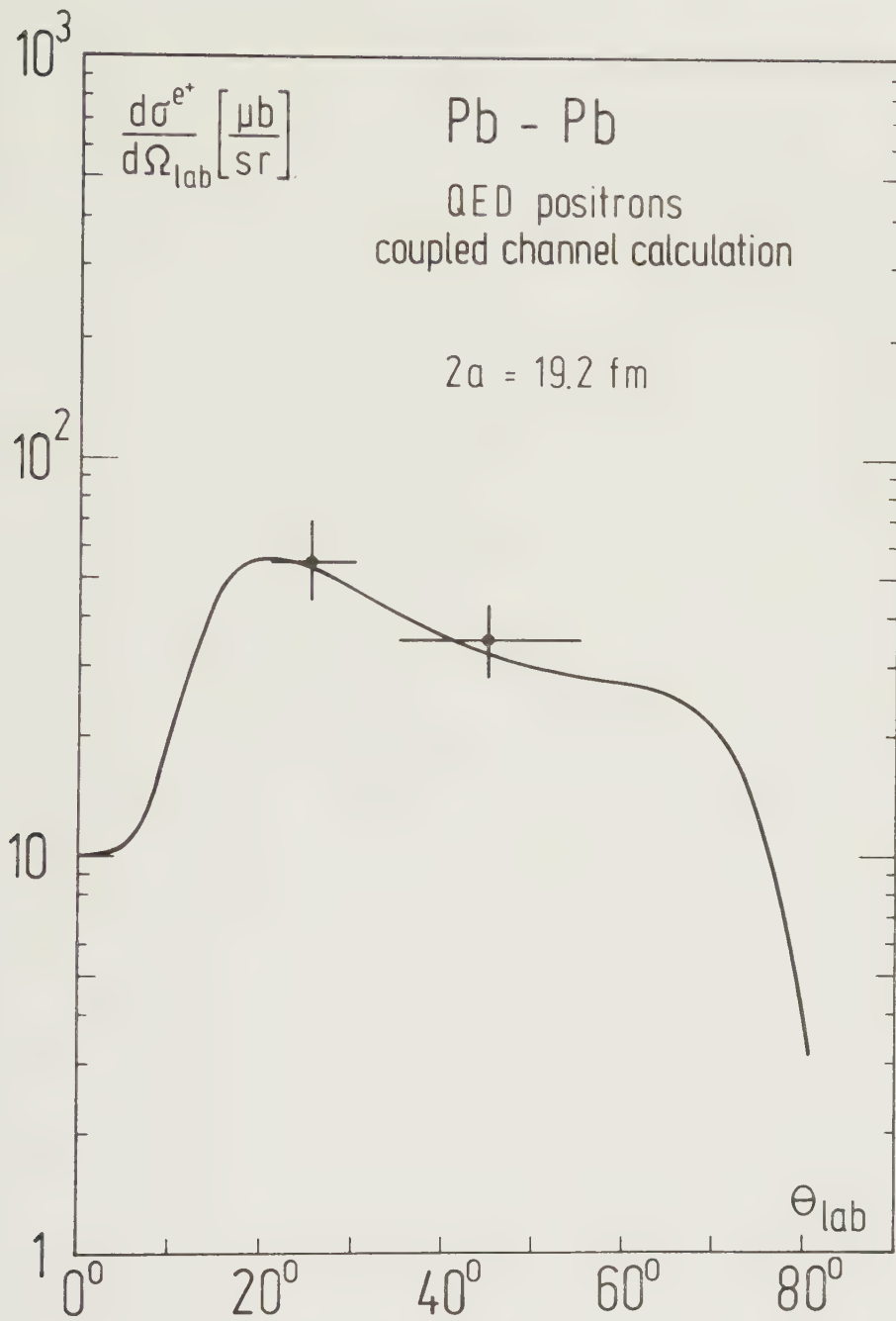


Abb. 35: Differentieller Positronenquerschnitt für Pb-Pb -
stöße bei $2a = 19.2 \text{ fm}$ gemessen in zwei Winkelfen-
stern ¹³⁰).

denz mit dem unter einem Winkel $\theta_{\text{lab}} = 45^\circ \pm 10^\circ$ gestreuten Teilchen in Fig. 36. Bei der Energie 5.9 MeV/u wurden die drei Stoßsysteme U-Pd, U-Pb und U-U untersucht. Das leichteste dieser Systeme hat eine Gesamtladung von $Z = 138$. Gemäß der starken Z-Skalierung sollten hier keine QED-Positronen auftreten. Tatsächlich wird das gemessene Spektrum vollständig und sehr genau durch den aus γ -Daten berechneten Untergrund der Kernanregung mit nachfolgender Konversion beschrieben. In den anderen Systemen liegt die Ausbeute wesentlich über dem berechneten Untergrund (untere Linien). Die vollen Linien folgen durch Addition des (wiederum symmetrisierten) theoretischen QED-Positronenspektrums. Im U-Pb-System stimmen sowohl Größe wie Form ausgezeichnet mit der Messung überein. Das experimentelle U-U-Spektrum hingegen scheint bei Energien größer als 500 keV steiler als berechnet abzufallen. Ob dieses abweichende Verhalten damit zu tun hat, daß das System überkritisch ist, läßt sich wohl nur durch weitere Messungen entscheiden. Die theoretischen Resultate dieser Arbeit lassen jedenfalls keine Anomalie im Spektrum erwarten.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß durch die bisher vorliegenden Experimente wesentliche Züge der Theorie der Positronenerzeugung in starken Feldern bestätigt werden. An der Existenz des Effekts selbst kann wohl nicht mehr gezweifelt werden. Die kinematischen Abhängigkeiten, insbesondere der steile Stoßparameterverlauf und der Anstieg mit der Einschußenergie stimmen mit der Theorie gut überein. Im U-Pb-System läßt sich auch die Form des Spektrums der emittierten Positronen vollständig erklären. Das besonders bemerkenswerte starke Anwachsen

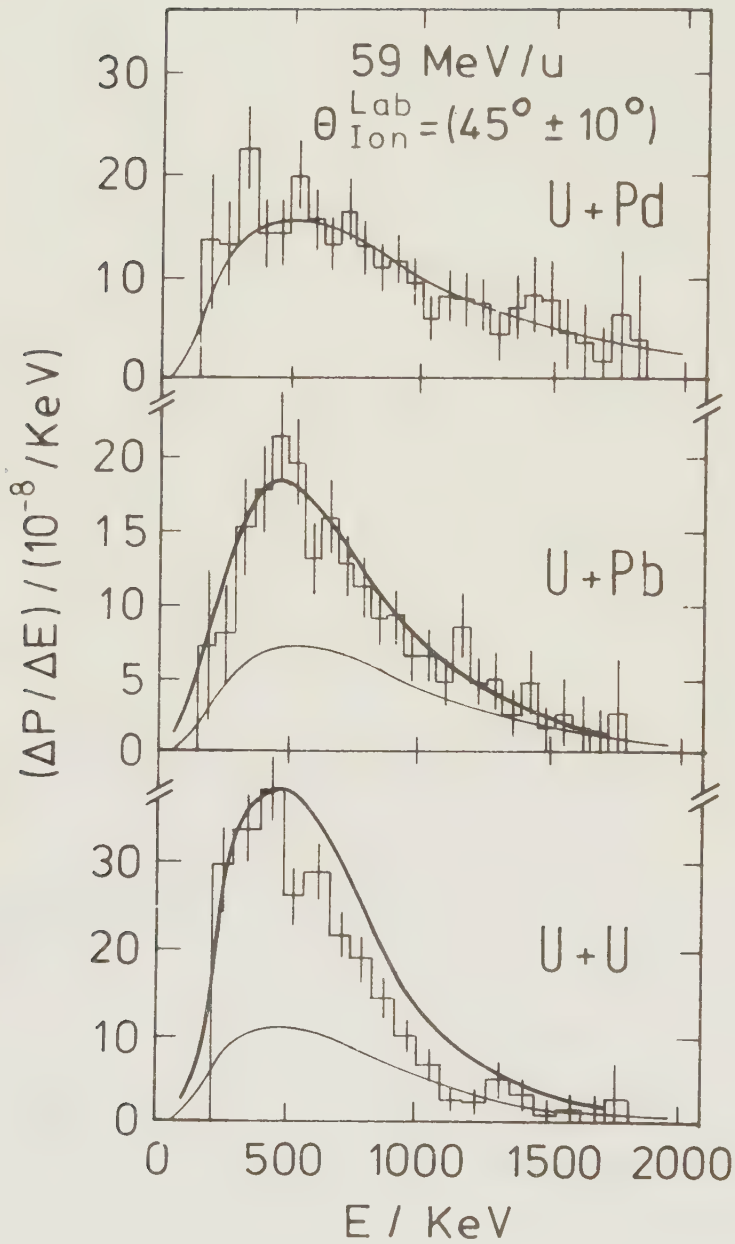


Abb. 36: Positronenspektren ^{140}U in den drei Stoßsystemen U - Pd, U - Pb, U - U ($Z = 138, 174, 184$) bei 5.9 MeV/u Einschubenergie unter dem Streuwinkel $\theta_{\text{Lab}} = 45^\circ \pm 10^\circ$. Im U - Pd -System läßt sich die Messung gut durch die Konversion nuklearer γ -Strahlung erklären. Für die beiden schwereren Systeme ist die Summe aus Untergrund- und QED-Positronen (obere Linie) eingezeichnet.

der Positronenproduktion mit der Gesamtladung Z des Systems wurde experimentell bestätigt. Dadurch wird klar bewiesen, daß es sich um einen Prozess handelt, der nur durch die relativistische Deformation der Wellenfunktionen des Elektron-Positron-Feldes im starken Coulombfeld des fast vereinigten quasimolekularen Systems erklärt werden kann.

Offen sind gegenwärtig noch einige Diskrepanzen in der absoluten Größe mit Abweichungen bis zu einem Faktor zwei. Allerdings scheinen hier auch die Experimente untereinander nicht konsistent zu sein. Besonders fällt dies bei einer Gegenüberstellung der Pb-Pb-Daten in Fig. 33 und 35, sowie beim Vergleich der Meßpunkte für U-Pb und Pb-U in Fig. 34 auf. Hier sollte die Auswertung der neuen, wesentlich verbesserten Experimente abgewartet werden.

Auf jeden Fall zeigen die Ergebnisse, daß es notwendig ist, dynamische Kopplungen zwischen den Kontinua und mehrstufige induzierte Prozesse unter Einbeziehung der stark gebundenen molekularen Zustände kohärent zu behandeln.

Für weitergehende zukünftige Experimente bieten sich zwei Möglichkeiten an. Ein direkter Schluß auf die Positronenerzeugung aus dem $1s\sigma$ -Zustand wäre durch (gegenwärtig noch nicht durchführbare) Experimente mit sehr schweren nackten Kernen möglich. Die Gelegenheit zu einer qualitativen Demonstration des Effekts der spontanen Positronenerzeugung könnte in sorgfältigen Untersuchungen von Stößen oberhalb der Coulombbarriere mit verlängerter Kontaktzeit der Kerne¹⁴⁵⁾ bestehen.

X) Stöße mit verlängerter Kontaktzeit der Kerne

1) Kernreaktionen im Spiegel atomphysikalischer Anregungen

Alle bisherigen Untersuchungen zur Atomphysik und QED über-
schwerer Quasimoleküle wurden wesentlich durch einen Umstand
bestimmt: Die Kinematik der Kernbewegung im Coulombfeld. Die
zum Erreichen kleiner internuklearer Abstände erforderliche
hohe Bahngeschwindigkeit führt zwangsläufig zu kurzen Wechsel-
wirkungszeiten und damit zu großer Stoßverbreiterung. Es ist
daher prinzipiell schwierig, Eigenschaften des vereinigten
"superatomaren" Systems mit hoher Präzision zu untersuchen.
Die Emissionsspektren von Röntgenstrahlung, δ -Elektronen oder
Positronen sind strukturlos oder zumindest stark verbreitert.

Die einzige Möglichkeit, die Wirkung der Coulombabstoßung
zu vermindern, bieten Stöße mit internuklearem Kontakt. Bei
Kernstreuung oberhalb der Coulombbarriere gibt es durch Ein-
setzen der attraktiven Kernkraft verschiedene Reaktionstypen,
denen eine verlängerte Wechselwirkungszeit zugeordnet werden
kann. Insbesondere bei leichten Stoßsystemen, z. B. $^{12}\text{C} - ^{12}\text{C}$,
findet man ausgeprägte Resonanzen, deren geringe Breite (bis
herab zu ~ 50 keV) auf Ausbildung eines Kernmoleküls schließen
läßt.¹⁴⁶⁾ Ein anderer Mechanismus ist die Compoundkern-Reak-
tion bei der ein vereinigter Kern gebildet wird, welcher spä-
ter wieder zerfällt. Nach der Vorstellung von N. Bohr befin-
det sich der Compoundkern in einem statistischen Gleichgewicht,
sodaß das Zerfalls- vom Eingangssystem unabhängig ist. Fusion-
Fission-Reaktionen wurden in Schwerionenstößen bis zu $Z_1 + Z_2$

≈ 120 nachgewiesen¹⁴⁷⁾.

Bei noch schwereren Systemen sind tief inelastische Reaktionen von Interesse¹⁴⁸⁾. Diese sind dadurch gekennzeichnet, daß sich die Kerne stark überlappen, durch Reibungsverluste abgebremst werden und kinetische Energie bis zu einigen 100 MeV verlieren. Die Kerne behalten dabei jedoch im wesentlichen ihre Identität bis auf Transfer von (bis zu einigen zehn) Nukleonen. Das "Aneinanderkleben" der Kerne äußert sich in einer Veränderung der Ablenkungsfunktion $\Theta(l)$, die den Streuwinkel in Abhängigkeit des Drehimpulses (bzw. Stoßparameters) angibt. Im Bereich mittlerer l -Werte kann es zu einem Umbiegen zu negativen Streuwinkeln kommen. Gleichzeitig steigt der Verlust an kinetischer Energie für zentralere Stöße (kleinere l). Durch Koinzidenz mit den bei bestimmtem Energieverlust und Winkel gestreuten Kernen sollte es daher möglich sein, experimentell Reaktionen mit langer Kontaktzeit zu identifizieren.

Bisher wurden eine Reihe von tief inelastischen Reaktionen in schwereren Systemen, etwa Kr-Er oder Xe-Bi untersucht und mit Hilfe eines phänomenologischen Modells auf Kontaktzeiten hin analysiert^{149),150)}. Auf diese Weise wurden Reaktionszeiten bis etwa 10^{-20} sec gefunden. Rehm und Mitarbeiter¹⁵¹⁾ fanden in einem Experiment, das knapp oberhalb der Coulombbarriere durchgeführt wurde ($^{208}\text{Pb} - ^{110}\text{Pd}$ bei $E_{\text{lab}} = 1180$ MeV) Werte bis $1.6 \cdot 10^{-20}$ sec bei einem Energieverlust von 200 MeV. Für sehr schwere Systeme ($\text{U}-\text{U}$ o.ä.) scheinen die bisher analysierten Stoßzeiten kleiner zu sein.

Im Rahmen der Fragmentationstheorie wurden für ^{238}U - ^{238}U -Stöße deutlich oberhalb der Coulomb-Barriere wegen der großen dynamischen Massen der Radialbewegung Reaktionszeiten bis etwa 10^{-20} sec vorhergesagt.¹³⁷⁾

Im Zusammenhang mit der Atomphysik sind Stöße mit verlängerter Reaktionszeit in zweierlei Hinsicht interessant:

(i) Durch Messung der Interferenz von Prozessen, die vornehmlich während des Ein- und Auslaufens der Stoßpartner geschehen ist es möglich, die Verzögerungszeit Δt zu bestimmen. Dieses Verfahren wurde zuerst für die Emission von nuklearer Bremsstrahlung vorgeschlagen¹⁵³⁾⁻¹⁵⁵⁾ und kürzlich erfolgreich auf p - ^{12}C Resonanzstreuung angewandt¹⁵⁶⁾ ($\Delta t = 2 \cdot 10^{-20}$ sec). Ebenso wird auch die atomare Ionisation durch eine Zeitverzögerung beeinflusst¹⁵⁷⁾⁻¹⁵⁹⁾, was für p - ^{58}Ni Resonanzstreuung experimentell nachgewiesen wurde¹⁶⁰⁾. Ein etwas anders geartetes Experiment benutzt das Intensitätsverhältnis der charakteristischen Röntgenstrahlung der Atome mit Kernladung Z und $Z+1$ zur Lebensdauerbestimmung des Compoundkerns. Für p - ^{112}Sn -Stöße wurden Zeiten im Bereich 10^{-17} sec gemessen¹⁶¹⁾.

Im Hinblick auf tief inelastische Schwerionenreaktionen schlagen wir vor, nach Interferenzstrukturen im Spektrum der emittierten γ -Elektronen zu suchen¹⁶²⁾. Dies würde eine eindeutige, modellunabhängige Bestimmung der Zeitskala gestatten, in der die Reaktion abläuft.

(ii) Andererseits sind, wie schon eingangs erwähnt, Stöße mit langer nuklearer Kontaktzeit sehr wertvoll zur Untersuchung des vereinigten atomaren Systems. Neben der Röntgenspek-

trooskopie¹⁶³⁾ gilt dies ganz besonders für die Positronenerzeugung in überkritischen Systemen¹⁴⁵⁾. Wenn die Kontaktzeit an die Größenordnung der Lebensdauer des eingetauchten Lochzustandes heranreicht kommt es durch spontane Übergänge zur Ausbildung einer charakteristischen Positronenlinie bei der Resonanzenergie des $1s$ -Zustandes. Hierzu sind allerdings recht große Δt erforderlich ($> 10^{-20}$ sec, siehe X.4). Die Beobachtung eines solchen Effekts würde den Übergang zum geladenen Vakuum eindeutig nachweisen.

2) Die nukleare Trajektorie in tief inelastischen Kernstößen

Wir wollen die Anregungen der Elektronen in Kernstößen oberhalb der Coulombbarriere untersuchen. Dabei soll, wie bisher schon, die Kernbewegung klassisch beschrieben werden^(§). Bei kleinen Abständen weicht die Trajektorie von der normalen Rutherford'schen Hyperbelbahn ab. Wie wir in Kap. II sahen, werden die elektronischen Anregungen durch die radiale Bewegung der Kerne verursacht. Es wird daher zur Erfassung des Haupteffekts der Kernreaktion ausreichen, ein schematisches

(§) Fußnote: Für die Bremsstrahlung wurde von Feshbach und Yennie¹⁵⁴⁾ eine Ableitung im Rahmen der Quantenmechanik angegeben, wobei der Zeitverzögerungsfaktor durch eine Funktion der Streuamplituden bei verschiedenen Energien ersetzt wird. Für die hier interessierenden Reaktionen ist eine voll quantenmechanische Rechnung sicher nicht möglich. Die Ableitung eines semiklassischen Ergebnisses wäre jedoch wertvoll.

Modell für die Trajektorie zu verwenden. Die radiale Bewegung während des Kontakts wird dabei vernachlässigt, insbesondere auch das Auftreten von Kompressionseffekten der Kernmaterie. Da wir uns hauptsächlich für Stoßenergien in der Nähe der Coulombbarriere interessieren, ist dies zulässig.

Wie in Abb. 37 dargestellt, kann man etwa annehmen, daß die Kerne aufeinander "abrollen": Das Projektil nähert sich dem Targetkern bis es beim Abstand R_0 zum Kontakt kommt. Anschließend haften die Kerne aneinander und das System dreht sich um einen Winkel $\Delta\varphi$ bis es wieder zerfällt und auf einer Hyperbelbahn auseinanderläuft. Weil sowohl kinetische Energie als auch Drehimpuls in innere Anregungen dissipiert werden, können sich die Parameter der Hyperbeläste voneinander unterscheiden. Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß sich der Abstand R_0 nicht mehr zeitlich verändert. Die Dissipation der radialen Bewegungsenergie findet also beim Einschwenken auf die Kreisbahn statt. Dies ist nicht unvernünftig, da die zugehörige Dissipationszeit sehr klein zu sein scheint¹⁵⁰⁾.

Es gelten nun die Beziehungen für den Streuwinkel:

$$\vartheta = \pi - \vartheta_i - \vartheta_f - \Delta\varphi, \quad (1)$$

Ablenkungswinkel der einlaufenden Coulombbahn:

$$\vartheta_i = \arctan \frac{b_i}{a_i} - \arctan \left(\frac{b_i}{a_i} \frac{\sqrt{\left(\frac{b_i}{a_i} - 1\right)^2 - \left(\frac{b_i}{a_i}\right)^2 - 1}}{\frac{R_0}{a_i} + \left(\frac{b_i}{a_i}\right)^2} \right) \quad (2)$$

mit dem Stoßparameter b_i und

$$a_i = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2 E_i \text{ cm}} \quad .$$

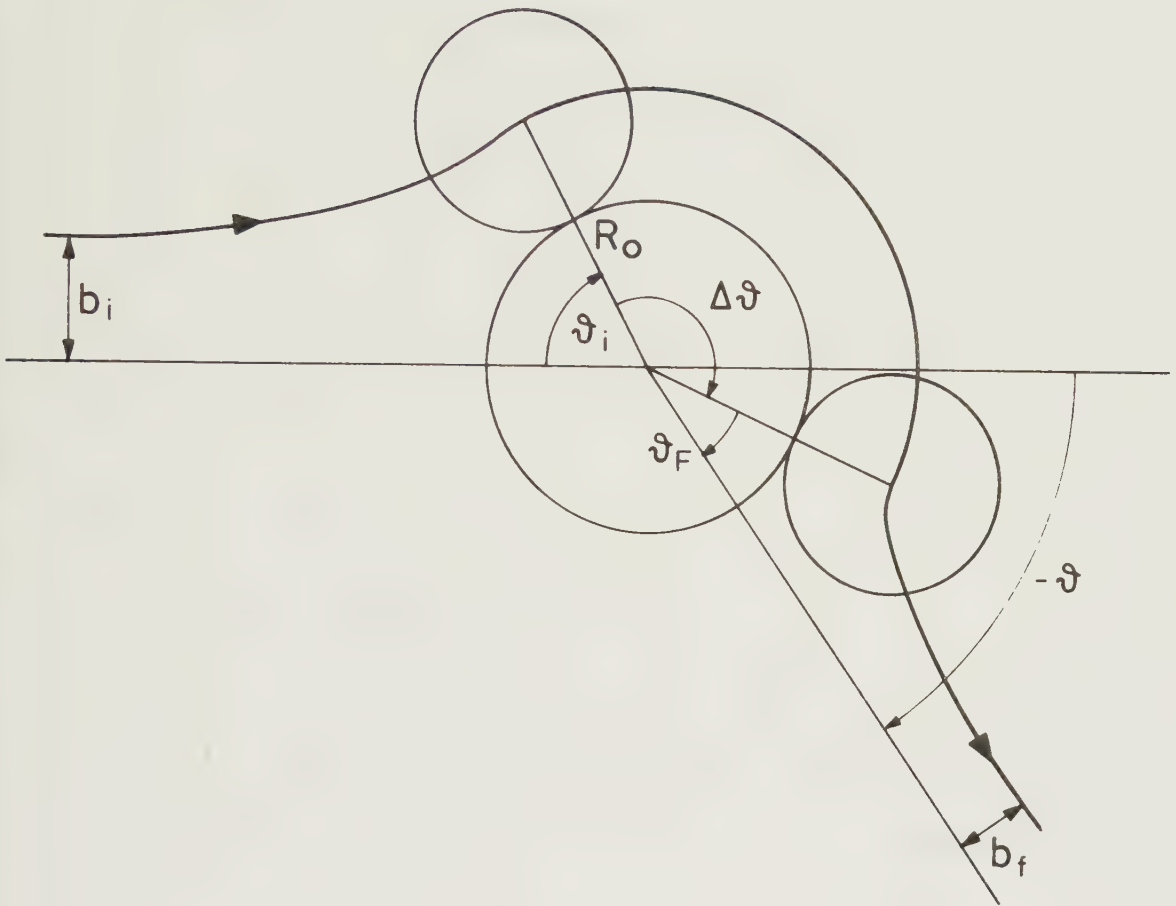


Abb. 37: Schematisches Modell für die Bewegung der Kerne in Stößen mit nuklearem Kontakt. Die Bahn setzt sich aus zwei Hyperbelästen und einem Kreissegment mit dem Drehwinkel $\Delta\vartheta$ zusammen.

Für den auslaufenden Ablenkwinkel ϑ_f gilt die entsprechende Gleichung mit b_f und a_f . Die Beziehung (2) kann man leicht mit Hilfe der Parameterdarstellung der Hyperbel (VIII.1) gewinnen.

Zur Festlegung der auslaufenden Bahnhälfte muß noch eine Annahme über den Drehimpulsverlust gemacht werden. Es ist sinnvoll, einen exponentiellen Abfall der Rotationsfrequenz bis zu einem Grenzwert ω_{st} anzusetzen¹⁴⁹⁾:

$$\omega(t) = \omega_{st} + (\omega_i - \omega_{st}) e^{-\gamma t} \quad (3)$$

was zum Drehwinkel

$$\Delta\vartheta = \omega_{st} \Delta t + \frac{1}{\gamma} (\omega_i - \omega_{st}) (1 - e^{-\gamma \Delta t}) \quad (4)$$

führt. Dabei ist $\omega_i = \frac{L_i}{I_{rel}}$ und $\omega_{st} = \frac{I_{rel}}{I_{rel} + I_{int}} \omega_0$.

In der letzten Beziehung wurde angenommen, daß zwei Kugeln ohne Schlupf aufeinander abrollen (sticking limit) und entsprechend ihrem Trägheitsmoment I_{int} Drehimpuls aufgenommen haben:

$$L = L_i = I_{rel} \omega_0 = (I_{rel} + I_{int}) \omega_{st}. \quad (5)$$

Verwendet man für die Trägheitsmomente die klassischen Werte für starre Kugeln, dann ergibt sich $\omega_{st} = \frac{5}{7} \omega_0$ (symmetrisches System).

Bei Vorgabe von a_i , b_i und Δt (oder $\Delta\vartheta$) ist nun die Kinematik vollständig bestimmt:

$$E_f = E_{Coul} + E_{rot} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_0} + \frac{1}{2} \frac{L_f^2}{I_{rel}} \quad (6)$$

mit

$$L_f = I_{\text{rel}} \omega(\Delta t) .$$

Wegen der Annahme totaler radialer Dissipation beginnt der auslaufende Hyperbelast notwendigerweise am Scheitelpunkt, also $b_f = \sqrt{R_0(R_0 - 2a_f)}$, damit folgt besonders einfach $\gamma_f = \arctan(b_f/a_f)$.

Dieses Modell läßt sich noch verfeinern um radiale Dissipation und veränderliche Kerndeformation zu berücksichtigen¹⁵⁰⁾. Auf diese Weise wurden von Wolschin et al. die oben zitierten Reaktionszeiten für tief inelastische Stöße durch Anpassung an experimentelle Daten gewonnen.

3) Einfluß auf die Ionisation

Durch das Auftreten einer Kernreaktion mit verlängerter Kontaktzeit Δt wird die Entwicklung atomarer Anregungen beeinflusst. Dies beruht nicht so sehr auf Kopplungen während des Kontakts der Kerne, sondern auf der Änderung des Phasensintegrals $\chi_p = \int^t E_p(t') dt'$. Im gekoppelten Differentialgleichungssystem (II.12) verschwindet zwar infolge $\dot{R} = 0$ in diesem Bereich die radiale Anregung, jedoch springen die Phasen um $\Delta\chi_{pq} = (E_p(R_0) - E_q(R_0))\Delta t$. Dies beeinflusst die Interferenz der Beiträge im ein- und auslaufenden Ast der Bahnbewegung und führt zu veränderten asymptotischen Anregungsamplituden.

Am einfachsten läßt sich der Effekt in erster Ordnung Störungstheorie untersuchen. Die Amplitude für den Übergang $i \rightarrow f$

ist nach (VIII.4) die Fouriertransformierte (mit variabler Frequenz $E_f(t) - E_i(t)$) der radialen Kopplung $\hat{R} \langle \varphi_f | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_i \rangle \equiv D_{fi}$. Die Zeitverzögerung ändert dann die Amplitude

$$\begin{aligned} a_{if} &= - \int_{-\infty}^0 dt D_{fi} e^{-i\chi_{if}(t)} - \int_0^{\Delta t} dt D_{fi} e^{-i\chi_{if}(t)} - \int_{\Delta t}^{\infty} dt D_{fi} e^{-i\chi_{if}(t)} \\ &= - \int_{-\infty}^0 dt D_{fi} e^{-i\chi_{if}(t)} - e^{-i(E_i(R_0) - E_j(R_0))\Delta t} \int_0^{\infty} dt \tilde{D}_{fi} e^{-i\tilde{\chi}_{if}} \end{aligned} \quad (7)$$

wobei im letzten Integral Energie und Matrixelement von einem Stoß mit gleicher Kinematik aber ohne Zeitverzögerung zu nehmen sind. Das zweite Integral läßt sich wegen $\tilde{D}_{fi}(t) = -\tilde{D}_{fi}(-t)$ durch Zeitumkehr umschreiben

$$- \int_0^{\infty} dt \tilde{D}_{fi}(t) e^{-i\tilde{\chi}_{if}(t)} = + \int_{-\infty}^0 dt \tilde{D}_{fi}(t) e^{i\tilde{\chi}_{if}(t)} = - \tilde{a}_{fi}^*(0). \quad (8)$$

Es wurde vorausgesetzt $\chi_{fi}(-t) = -\chi_{fi}(t)$, was nur für die Wahl $t_0 = 0$ im Phasenintegral stimmt. Ein anderer Wert von t_0 würden die folgenden Überlegungen etwas komplizieren (ohne natürlich das Endresultat zu verändern).

Also folgt

$$a_{if}(\infty) = a_{if}(0) - e^{-i\Delta E_{if}\Delta t} \tilde{a}_{if}^*(0). \quad (9)$$

$\tilde{a}_{if}$ ist dabei die zur Rutherfordhyperbel mit den Parametern a_f und b_f gehörende Amplitude. Die Wirkung der Zeitverzögerung ist also bei Kenntnis der beiden komplexen Amplituden $a_{if}(0)$ und $\tilde{a}_{if}(0)$ analytisch bestimmbar. Im Falle $a_{if} = \tilde{a}_{if}$, d.h. ohne Energieverlust, wird der Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit besonders einfach, nämlich

$$|a_{if}|^2 = 4 \left(\operatorname{Re} a_{if}(0) \sin \frac{\Delta\chi_{fi}}{2} + \operatorname{Im} a_{if}(0) \cos \frac{\Delta\chi_{fi}}{2} \right)^2 \quad (10)$$

mit $\Delta\chi_{fi} = \Delta E_{fi}(R_0) \Delta t$.

Offenbar erhält man im Anregungsspektrum (etwa der δ -Elektronen) Oszillationen als Funktion der Energie. Diese haben die Periodenlänge

$$E = \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \quad (11)$$

Dies ist in Abb. 38 am Beispiel eines U - U - Stoßes bei $2a = 12$ fm (Laborenergie 8.54 MeV/u) demonstriert. Aufgetragen ist der $1s\delta$ -Anteil des δ -Elektronenspektrums, gerechnet in Störungstheorie, mit Zeitverzögerungen $t = 0, 5$ und $10 \cdot 10^{-21}$ sec. Es wurde ein Stoßparameter von $b = 8$ fm gewählt, so daß der angenommene fiktive Kontaktabstand $R_0 = 16$ fm gerade streifend ($\dot{R} = 0$) erreicht wird. Die Rechnung berücksichtigt keinen Energieverlust, die zugehörigen Drehwinkel $\Delta\varphi$ sind dann 0° , 363° und 727° . Abb. 38 zeigt Oszillationen um das exponentiell abfallende Spektrum für den reinen Coulombstoß ($\Delta t = 0$).

Das Zustandekommen der Oszillationen wird noch klarer, wenn man die Zeitabhängigkeit der Anregungsamplitude in der komplexen Ebene aufträgt. Die Verzögerungszeit bewirkt dann eine Drehung des auslaufenden Asts ($t > 0$) um einen Winkel $\Delta\chi_{fi}$. Abb. 39 illustriert dies anhand eines 7 MeV/u Xe - Pb - Stoßes. Es ist klar, daß die Interferenzen schwächer werden, wenn die beiden Spiraläste nicht mehr symmetrisch sind, d.h. bei Energieverlust in der Kernreaktion. Die Periodenlänge ist davon jedoch unabhängig.

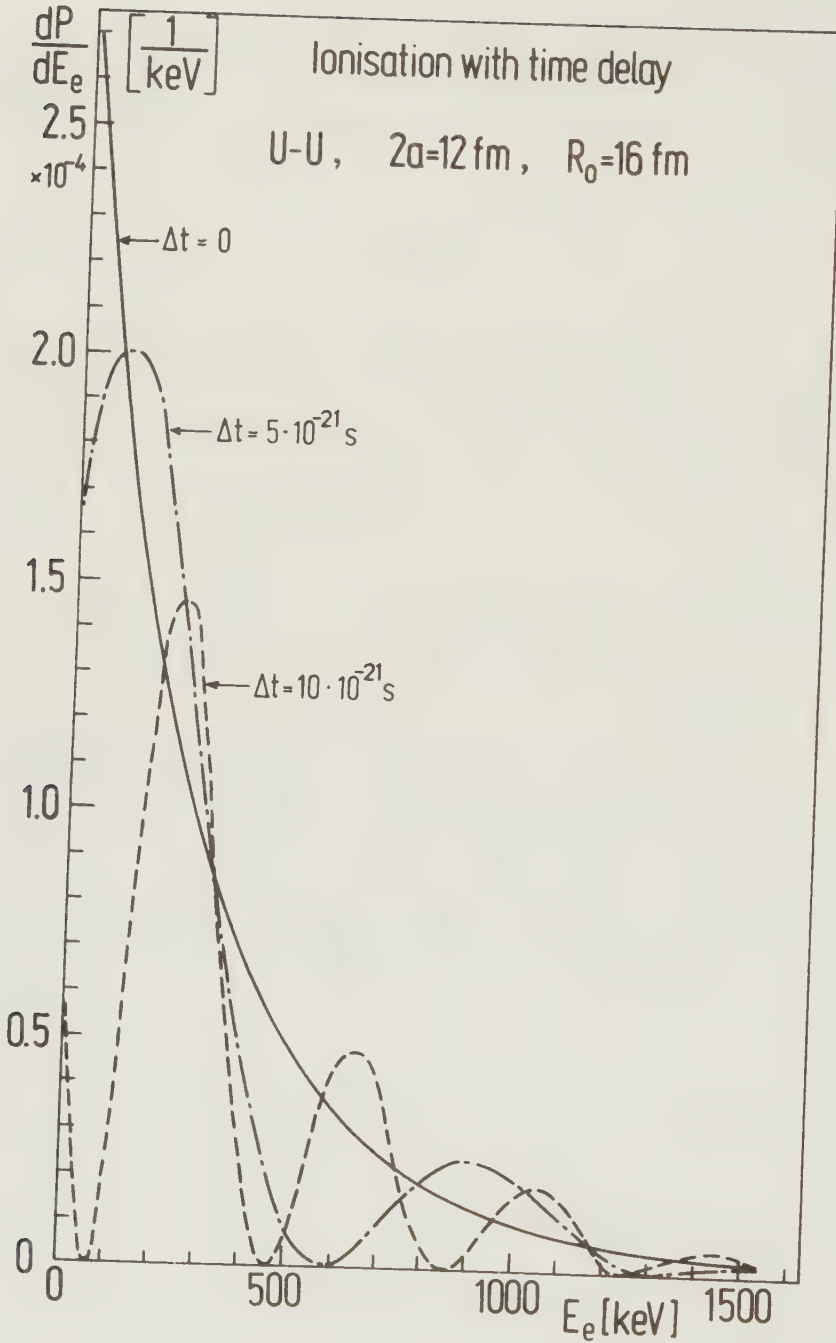


Abb. 38: Spektrum der emittierten δ -Elektronen in hochenergetischen U-U-Stößen mit $2a = 12$ fm, $b = 8$ fm und dem Kontaktabstand $R_0 = 16$ fm für drei Werte der Verzögerungszeit Δt . Die Breite der resultierenden Oszillationen im Elektronenspektrum ist ein Maß für die Reaktionszeit.

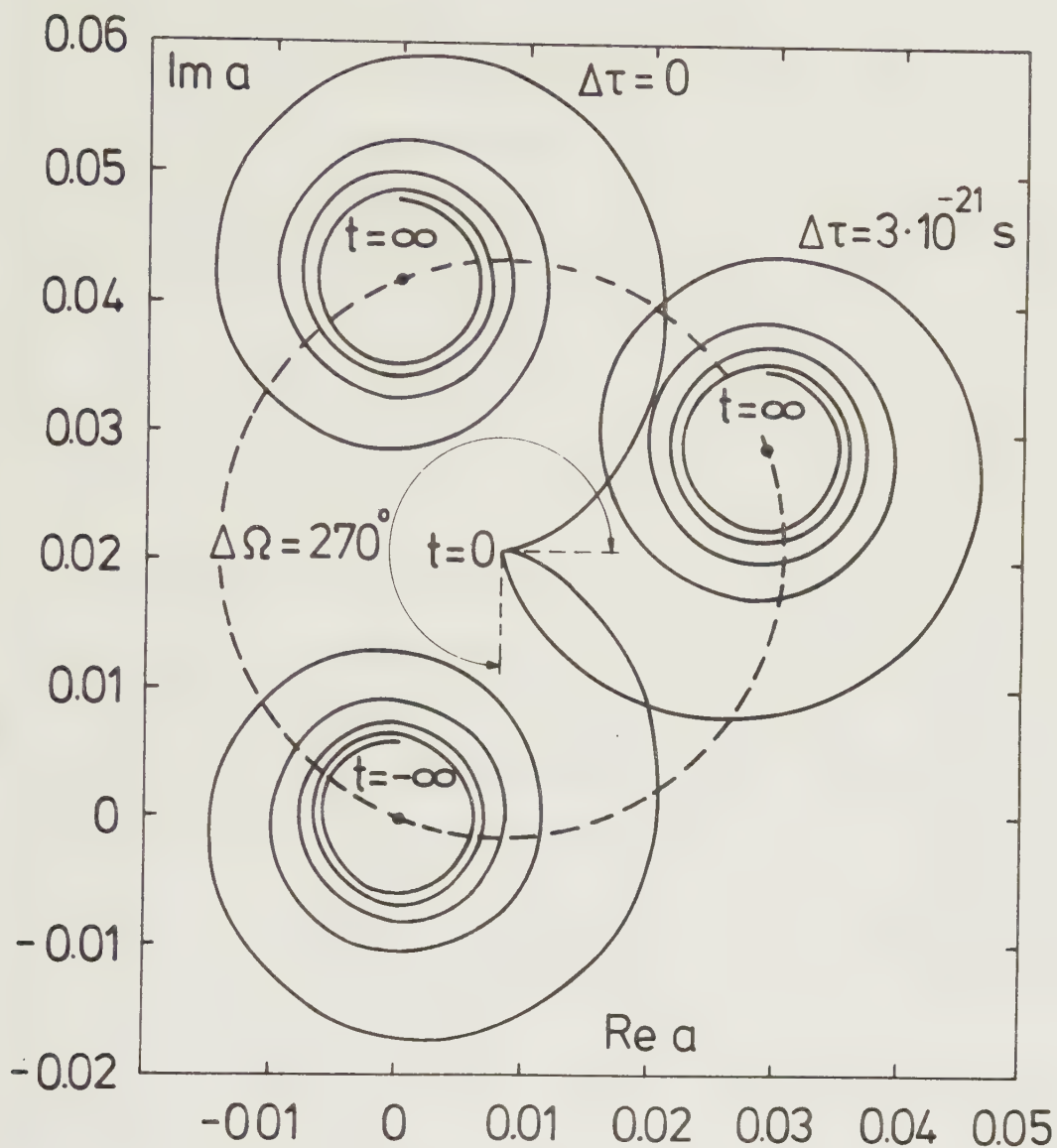


Abb. 39: Die Bahn der Amplitude $a_{E,1ss}^{(1)}(t)$ in der komplexen Ebene (vgl. Abb. 16). Die Zeitverzögerung am Umkehrpunkt bewirkt eine Drehung des auslaufenden Asts der Spirale.¹⁶²⁾

Rechnungen von Soff¹⁶⁴⁾ zeigen, daß auch die Lösung der gekoppelten-Kanal-Gleichungen mit Zeitverzögerung nach der in Kap. IX beschriebenen Methode Oszillationen liefert. Obwohl viele unterschiedliche Phasen $\Delta \chi_{pq}$ miteinander interferieren bleiben starke Strukturen im δ -Elektronen-Spektrum sichtbar.

Die Beobachtung dieses Effekts wäre ein wertvolles Hilfsmittel zum Studium der Kernphysik tief inelastischer Stöße. Man hätte eine direkte, von Modellannahmen über den Reaktionsmechanismus völlig unabhängige Messung der Reaktionszeiten im Bereich von $10^{-21} \dots 10^{-19}$ sec.

Abgesehen von experimentellen Schwierigkeiten (starker Untergrund von Elektronen aus Konversion angeregter Kernniveaus) gibt es noch folgendes Problem: Die Interferenzstrukturen werden ausgewaschen, wenn Δt keinen scharfen Wert hat, sondern einer Wahrscheinlichkeitsverteilung folgt. Wir wollen dies in zwei Modellen näher untersuchen.

(i) Die Verteilung ist eine Exponentialfunktion

$$f(\Delta t) = \frac{1}{\tau} e^{-\Delta t/\tau} \quad (12)$$

Dieser Ansatz ist sinnvoll bei Bildung eines Compoundkerns mit der Lebensdauer τ . Gl. (10) läßt sich mit der Verteilung (12) über alle Δt integrieren:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dE_f} &= \int_0^\infty d\Delta t \quad |a(\Delta t)|^2 f(\Delta t) \\ &= 2 \left\{ (\text{Re } a_0)^2 + (\text{Im } a_0)^2 - \frac{1}{1 + (\Delta E \tau)^2} \cdot \right. \\ &\quad \left. ((\text{Re } a_0)^2 - (\text{Im } a_0)^2 - 2 \text{Re } a_0 \text{Im } a_0 \Delta E \tau) \right\} \quad (13) \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen $a_0 = a_{if}(0)$ und $\Delta E = E_f(R_0) - E_i(R_0)$. Offensichtlich sind durch den Mittelungsprozess die Oszillationen eliminiert worden. Der Einfluß der Zeitverzögerung äußert sich nur noch in einer Überlagerung von Real- und Imaginärteil der Ionisationsamplitude bei $t = 0$. In normalen Coulomb-Stößen wird nur der Imaginärteil gemessen. Wegen des unterschiedlichen Verhaltens der beiden Anteile sollte sich der Abfall des Delta-Elektronen-Spektrums etwas verändern.

Gl. (13) enthält die beiden Grenzfälle

$$\frac{dP}{dE_f} = 4 (\text{Im } a_0)^2 \quad \text{für} \quad \Delta E \tau \rightarrow 0 \quad \text{und}$$

$$\frac{dP}{dE_f} = 2 (\text{Re } a_0)^2 + 2 (\text{Im } a_0)^2 \quad \text{für} \quad \Delta E \tau \rightarrow \infty$$

entsprechend Stößen ohne Zeitverzögerung und Stößen mit totaler Fusion.

(ii) Eine gaussförmige Verteilung um einen Mittelwert T_0

$$f(\Delta t) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \tau} e^{-\left(\frac{\Delta t - T_0}{\tau}\right)^2} \quad (14)$$

führt auf

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dE_f} = 2 \left\{ (\text{Re } a_0)^2 + (\text{Im } a_0)^2 - e^{-\left(\frac{\Delta E \tau}{2}\right)^2} \right. \\ \left. ((\text{Re } a_0)^2 - (\text{Im } a_0)^2) \cos \Delta E T_0 - 2 \text{Re } a_0 \text{Im } a_0 \sin \Delta E T_0 \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

Die oszillierenden Terme werden also durch einen Exponentialfaktor $\exp(-(\Delta E \tau / 2)^2)$ gedämpft. Wegen $\Delta E T_0 = 2 \pi N$ findet man für die Zahl N der beobachtbaren Oszillationen

die Bedingung

$$N \leq \frac{1}{\pi} \left(\frac{T_0}{\tau} \right), \quad (16)$$

sie wird also kleiner sein als das Reziproke der relativen Unschärfe $\frac{\tau}{T_0}$ der Verzögerungszeit Δt . Hierbei werden die Perioden schon von der Energie $E_{1s}(R_0)$ ab gezählt, liegen also nur zum Teil im beobachtbaren δ -Elektronen-Spektrum.

Die Bedingung (16) zeigt, daß die vorgeschlagene Messung der Reaktionszeit wohl nur möglich sein wird, wenn es gelingt, durch Koinzidenzbedingungen Stöße mit einem wohldefinierten Wert von Δt auszuwählen. Gleichzeitig liefert (16) eine obere Grenze für die messbaren Werte von Δt . Sollte die Verzögerungszeit nicht scharf genug definiert sein, dann wäre aus (natürlich weniger schlüssigen) quantitativen Messungen der Ionisationsrate¹⁴³⁾ oder der Steigung des δ -Elektronen-Spektrums noch Information über die Stoßkinematik zu gewinnen.

4) Einfluß auf die Positronenerzeugung

Für die Positronenemission gelten die Aussagen des letzten Abschnitts unverändert. Insbesondere beschreibt Gl. (10) auch das Verhalten der Wahrscheinlichkeit für direkte Übergänge zwischen den Kontinua als Funktion der Verzögerungszeit. Da induzierte Mehrstufenprozesse eine große Rolle spielen, werden wir zunächst auch hierfür einen analytischen Ausdruck angeben. Das Resultat sind wieder Oszillationen mit wachsendem Δt . Die Situation ändert sich jedoch wesentlich, wenn ein überkriti-

sches System behandelt wird: Dann steigt durch den Zerfall des "eingetauchten" Lochzustandes die Positronenemission mit wachsender Kontaktzeit an¹⁴⁵⁾. In Abschnitt V hatten wir dies im Autoionisations-Formalismus für ein Modell mit sprunghafter Änderung des Potentials schon gezeigt. Hier sollen die ersten Ergebnisse einer realistischen dynamischen Rechnung (in Störungstheorie) im Rahmen des Projektionsformalismus aus Kap. VII diskutiert werden.

Betrachten wir zunächst die Amplitude zweiter Ordnung für einen Übergang $i \rightarrow f$ mit dem Zwischenzustand n . Der Einfluß der Zeitverzögerung Δt läßt sich genau wie in Gl. (7) ... (10) für die erste Ordnung behandeln:

$$\begin{aligned} a_{if;n}^{(2)}(\infty) &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \, a_{in}^{(1)}(t) D_{fn} e^{-i\chi_{nf}} \\ &= - \int_{-\infty}^0 dt \, a_{in}^{(1)}(t) D_{fn} e^{-i\chi_{nf}} - e^{-i\Delta\chi_{nf}} \int_0^{\infty} dt \, a_{in}^{(1)}(t) \tilde{D}_{fn} e^{-i\tilde{\chi}_{nf}} \end{aligned}$$

und nach einigen Umformungen

$$\begin{aligned} a_{if;n}^{(2)}(\infty) &= a_{if;n}^{(2)}(0) - \tilde{a}_{if;n}^{(2)*}(0) e^{-i\Delta\chi_{if}} + \\ &+ \tilde{a}_{nf}^{(1)*}(\tilde{a}_{in}^{(1)*}(0) e^{-i\Delta\chi_{if}} - a_{in}^{(1)}(0) e^{-i\Delta\chi_{nf}}) \quad (17) \end{aligned}$$

Jetzt ist die Kenntnis der drei Amplituden $a_{if;n}^{(2)}(0)$ und $a_{nf}^{(1)}(0)$, $a_{in}^{(1)}(0)$ sowie bei Energieverlust der entsprechenden Amplituden für den zweiten Ast der Trajektorie notwendig, um die Anregungswahrscheinlichkeit als Funktion von Δt zu bestimmen. Die Gl. (17) enthält neben der Übergangsfrequenz $E_i(R_0) - E_f(R_0)$ noch die Frequenz $E_n(R_0) - E_f(R_0)$

vom Zwischen- zum Endzustand. Dies führt zu komplizierten Schwebungen in der Übergangswahrscheinlichkeit, wenn Δt sich ändert. Abb. 40 zeigt dies für die induzierte Positronenerzeugung aus dem $1s\sigma$ -Niveau. Für den (hypothetischen) Fall von zentralen Pb-Pb Stößen mit $2a = 15.8 \text{ fm}$, $E_e = 1.02$, $E_p = -1.7$ und variabler Verzögerungszeit $\Delta t = 0$ bis $8 \cdot 10^{-21} \text{ sec}$ ist analog zu Abb. 39 die komplexe Amplitude aufgetragen. Der Ort der asymptotischen Amplitude läuft jetzt auf einer Epizykloidenbahn um den Punkt $a (t=0)$ im Unterschied zur einfachen Kreisbahn beim direkten Übergang. Als Funktion der Positronenenergie findet man wieder Oszillationen mit der Periode aus Gl. (11).

Die bisherigen Überlegungen ergeben, daß Stöße mit sehr stark verlängerter Reaktionszeit nur ein Ausmitteln der Interferenz zwischen Anregungen im ein- und auslaufenden Ast der Trajektorie bewirken. Anders verhält es sich jedoch, wenn auch während der Kontaktzeit Übergänge stattfinden, wie dies bei der spontanen Positronenerzeugung der Fall ist. In überkritischen Stößen ($Z_1 + Z_2 > Z_{cr}$, $R < R_{cr}$) wird daher die Positronenemission mit Δt ansteigen. Dies ist die Grundlage des Vorschlags, tief inelastische Stöße sehr schwerer Kerne zur Untersuchung des Eintauchprozesses zu verwenden¹⁴⁵⁾.

Im Rahmen des Projektionsformalismus aus Kap. VII läßt sich der Effekt in Störungstheorie wieder leicht angeben. Während der Kontaktzeit $0 < t < \Delta t$ gibt es eine nichtverschwindende konstante Kopplung durch das Matrixelement $\langle \tilde{\psi}_{E_p} | H | \varphi_{1s} \rangle \equiv H_{E_p, 1s}$. Dies führt zur Amplitude

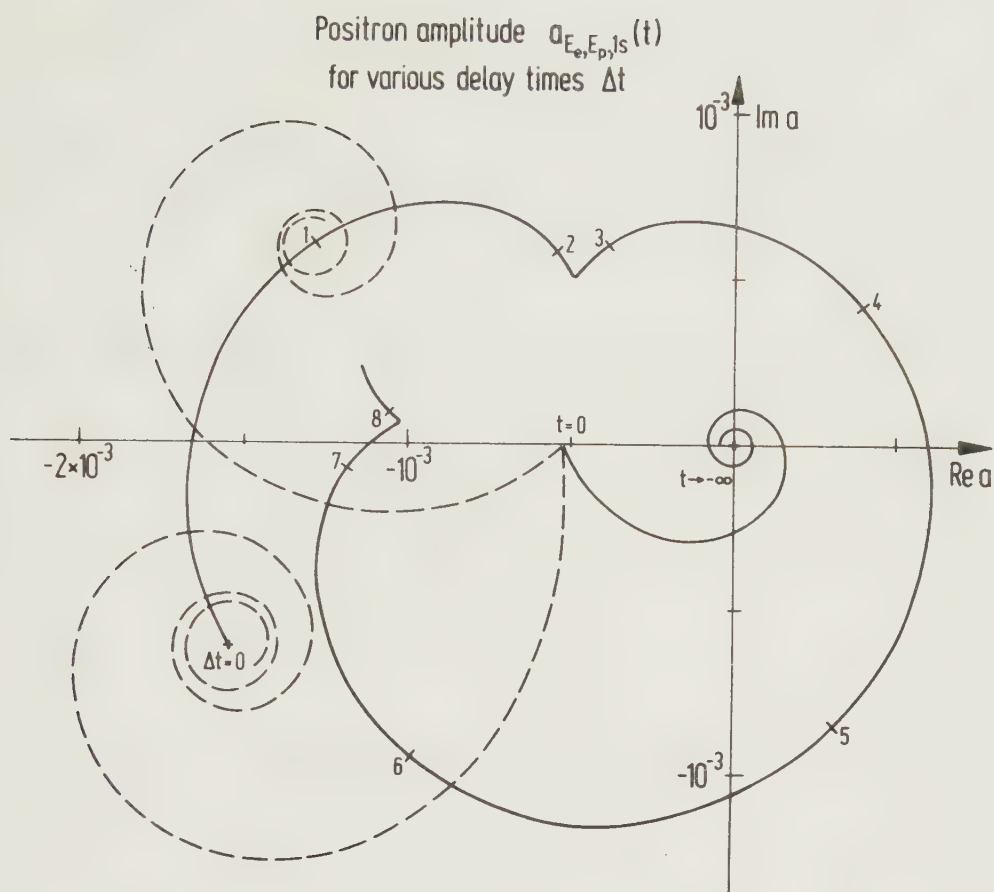


Abb. 40: Wie Abb. 39, jedoch für die Amplitude zweiter Ordnung $a_{E_e, E_p, 1s}^{(2)}(t)$ im Pb-Pb-Stoß bei $2a = 15.8 \text{ fm}$, $b = 0$. Als Funktion der angenommenen Verzögerungszeit Δt (in Einheiten von 10^{-21} sec) läuft die Endamplitude auf einer komplizierten Epizykloidenbahn.

$$\begin{aligned}
 a_{E_p, 1s}^{(1)} &= - \int_{-\infty}^0 dt (D_{E_p, 1s} + i H_{E_p, 1s}) e^{-i \chi_{E_p, 1s}} - \\
 &- i H_{E_p, 1s}(R_0) \int_0^{\Delta t} dt e^{-i \chi_{E_p, 1s}} - e^{-i \Delta \chi_{E_p, 1s}} \int_0^{\infty} dt (\tilde{D}_{E_p, 1s} + i \tilde{H}_{E_p, 1s}) \cdot \\
 &\cdot e^{-i \tilde{\chi}_{E_p, 1s}} \\
 &= a_{E_p, 1s}^{(1)}(0) - e^{-i \Delta \chi_{E_p, 1s}} \tilde{a}_{E_p, 1s}^*(0) + \frac{\langle \tilde{\psi}_{E_p} | H | \varphi_{1s} \rangle}{E_p - E_{1s}} (e^{-i \Delta \chi_{E_p, 1s}} - 1)
 \end{aligned} \quad (18)$$

Gegenüber (9) ist hier der letzte Term hinzugekommen. Das Betragsquadrat dieses Beitrags allein ist

$$\left(\frac{dP}{dE_p} \right)^{sp} = \frac{\Gamma}{2\pi} (\Delta t)^2 \left(\frac{\sin \frac{E_p - E_{1s}}{2} \Delta t}{\frac{E_p - E_{1s}}{2} \Delta t} \right)^2 \quad (19)$$

mit $\Gamma = 2\pi |H_{E_p, 1s}|^2$.

Man erhält also ein Spektrum mit einem Maximum bei $E_p = E_{1s}(R_0)$ und der Breite (zwischen zwei Nullstellen) von $\Delta E = 2\pi\hbar/\Delta t$. Die gesamte Emissionswahrscheinlichkeit folgt durch Integration über E_p und ist näherungsweise

$$P^{sp} \approx \int_{-\infty}^{\infty} dE_p \left(\frac{dP}{dE_p} \right)^{sp} \approx \Gamma \Delta t \quad (20)$$

während die Höhe des Maximums quadratisch mit Δt ansteigt. (Die Gl. (19) und (20) gelten natürlich nur, solange $\Gamma \Delta t \ll 1$ da sonst die Füllung des $1s\sigma$ -Zustands berücksichtigt werden müßte). Dieses Resultat bleibt auch bestehen, falls der $1s\sigma$ -Zustand anfänglich besetzt war. Der Zusatzterm in Gl. (18) wird dann mit der Lochamplitude zur Zeit $t = 0$ multipliziert.

Das Ergebnis numerischer Rechnungen ist in Abb. 41 und 42 dargestellt. Aufgetragen ist das störungstheoretisch berechnete Positronenspektrum für U-U-Stöße ($2a = 12$ fm, $b = 8$ fm, $R_0 = 16$ fm) mit verschiedenen Reaktionszeiten Δt unter Annahme eines leeren $1s\bar{\nu}$ -Zustands ($2 | a_{E_p, 1s}^{(1)} |^2$ in Abb. 41) oder eines Zweistufenprozesses mit vorhergehender Ionisation ($2 \int_1^\infty dE_e | a_{E_p, E_e; 1s}^{(2)} |^2$ in Abb. 42). Nur der $1s\bar{\nu}$ -Beitrag ist berücksichtigt.

In beiden Fällen ist zu erkennen, daß für große Zeiten Δt der Anteil des spontanen Prozesses zu dominieren beginnt und daß sich für $\Delta t \gtrsim 10^{-20}$ sec eine Linie im Positronenspektrum bei $E_p = E_{1s}(R_0) \cong -1.59$ mc² (ohne Abschirmung!) ausbildet. In Abb. 42 ist ferner bemerkenswert, daß die Positronenwahrscheinlichkeit für kleine Zeiten Δt durch destruktive Interferenz sogar absinkt. Anzeichen für ein solches Verhalten sind im Experiment ¹⁴⁰⁾ schon gefunden worden.

Zur quantitativen Berechnung der Positronenerzeugung in Stößen mit modifizierter Bahnbewegung der Kerne müssen die verschiedenen Beiträge kohärent behandelt werden, am besten wieder im Rahmen der gekoppelten-Kanal-Methode ¹⁶⁵⁾.

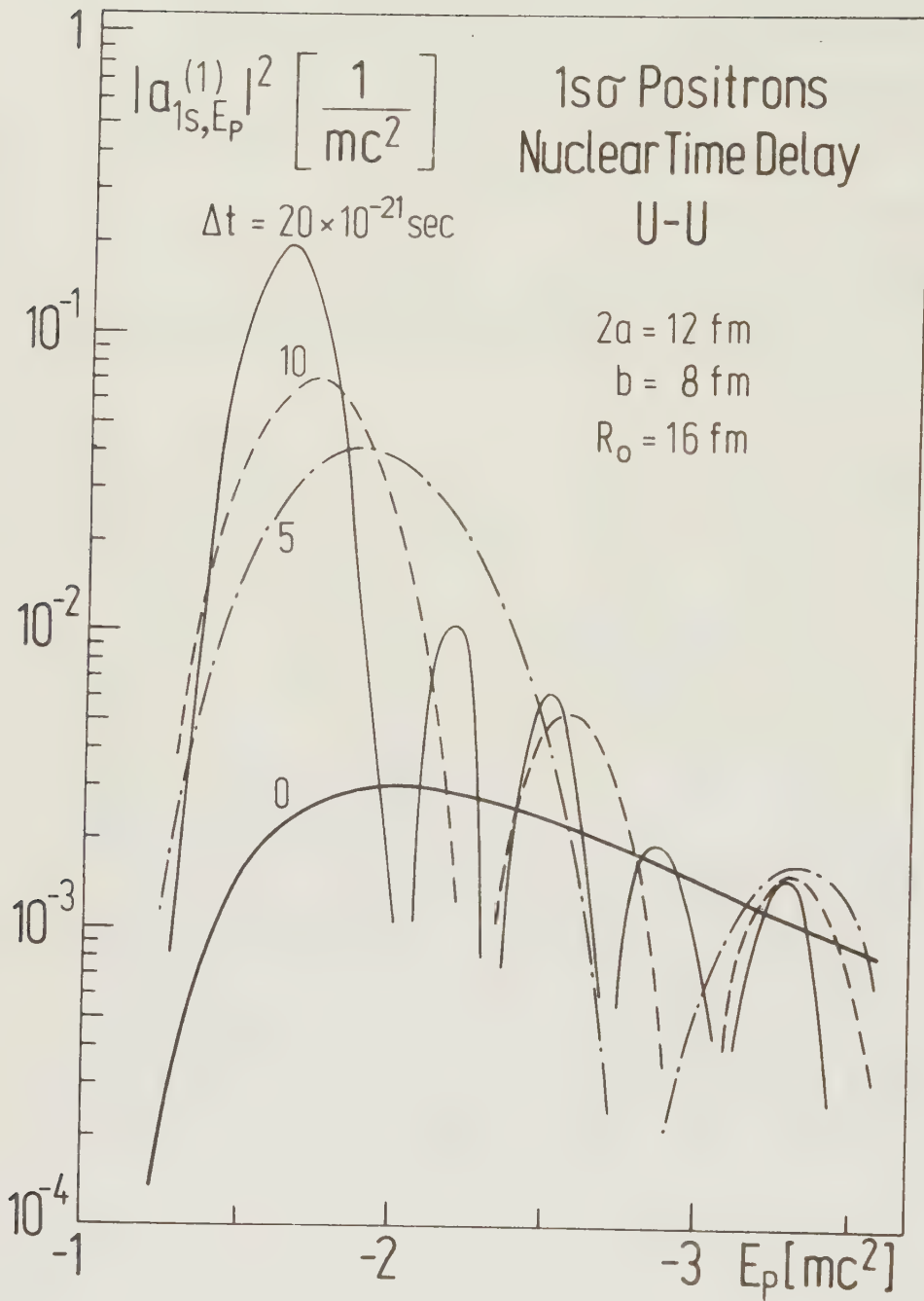


Abb. 41: Positronenspektrum erster Ordnung aus dem leeren 1s σ - Zustand für verschiedene hypothetische Verzögerungszeiten im U-U - Stoß mit $2a = 12 \text{ fm}$, $b = 8 \text{ fm}$. Bei großen Δt bildet sich eine Linie bei der Energie $E_{1s\sigma}(R_0)$ aus.

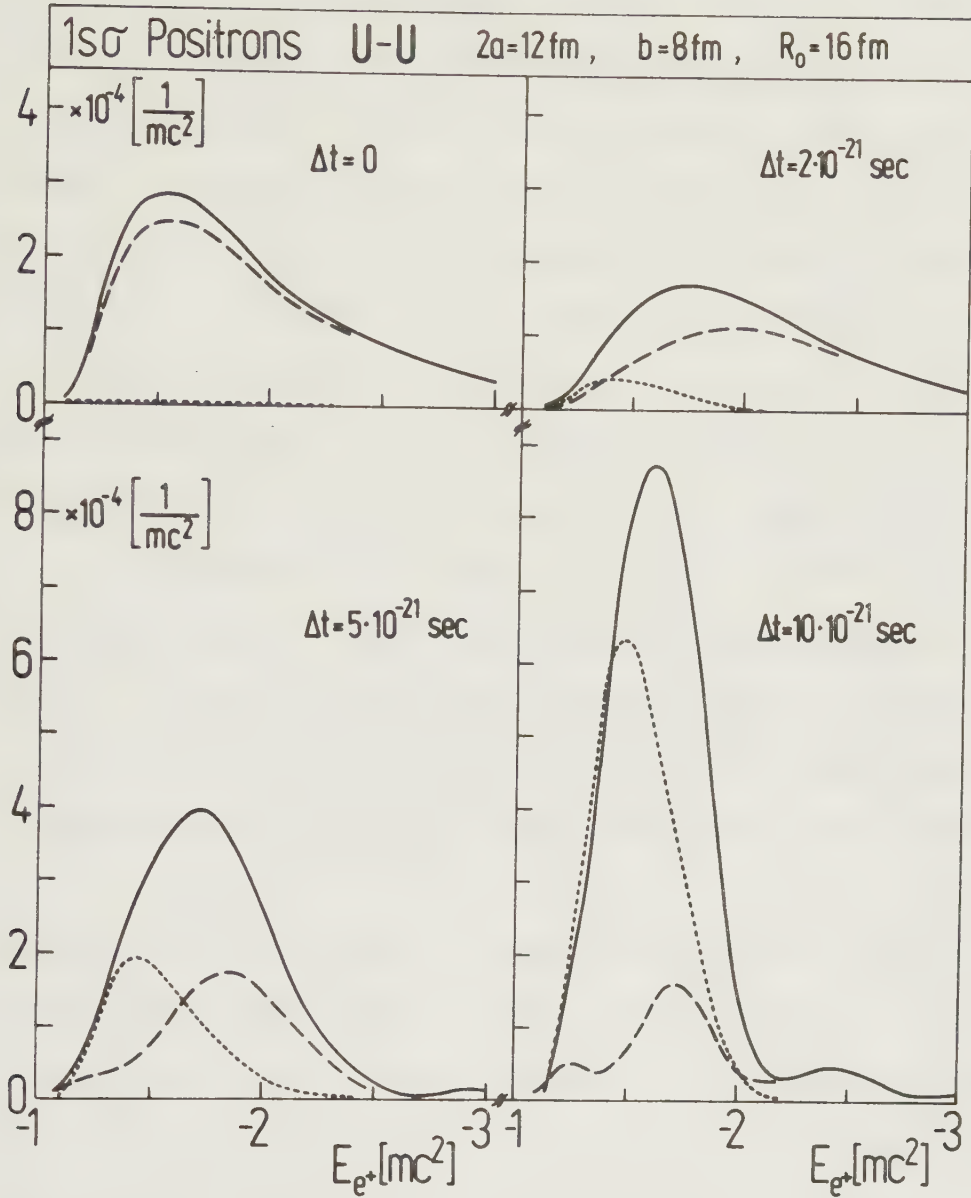


Abb. 42: Wie Abb. 41, jedoch für die induzierte Positronenerzeugung in zweiter Ordnung Störungstheorie $\int_1^\infty dE_e \left| a_{E_e, E_p; 1s\sigma} \right|^2$. Punktiert: nur spontane Kopplung. Gestrichelt: nur induzierte Kopplung. Durchgezogen: kohärente Summe. Bei großen Δt dominiert der spontane Anteil.

XI) Zusammenfassung

Schwerionenstöße bieten die vielversprechende Möglichkeit, die Atomphysik und Quantenelektrodynamik bis in den Kernladungsbereich $Z \approx 190$ auszudehnen. Durch Beschleuniger, die die schwersten Ionen auf Energien bis zur nuklearen Coulombbarriere und darüber bringen können, ist es möglich geworden, zumindest kurzfristig (im Bereich 10^{-20} sec) die Ladung zweier Kerne zu vereinigen. Die dadurch erzeugten starken Felder können Elektronen in Zustände mit Bindungsenergie größer als ihre Ruhmasse versetzen. Im stationären Fall führt das starke Coulombfeld der vereinigten Kerne zur massiven Kontraktion der Wellenfunktionen sowie bei überkritischen Systemen ($Z_1 + Z_2 \gtrsim 172$) zum "Zerfall des neutralen Vakuums" unter spontaner Emission von Positronen. Als Folge sind im Schwerionenstoß starke Anregungen durch die Kernbewegung beobachtbar.

In der vorliegenden Arbeit wurden die resultierenden Anregungsprozesse quantitativ untersucht. Dazu wurde zunächst das semiklassische Modell für elektronische Anregungen des Ein- und Vielteilchensystems diskutiert. Es zeigte sich, daß es am günstigsten ist, das quasimolekulare Modell zu verwenden. Zur Berechnung von Energien und Matrixelementen wurde die Zweizentren-Diracgleichung in Monopolnäherung gelöst. Die Erzeugung von K-Löchern, Delta-Elektronen und insbesondere die Positronenemission wurde in Störungstheorie und durch numerische Lösung der gekoppelten-Kanal-Gleichungen berechnet. Letzteres erwies sich als notwendig, da die radialen Kopplungen

zwischen den verschiedenen quasimolekularen Niveaus in schweren Stoßsystemen sehr stark sind. Vielstufenprozesse tragen wesentlich zur Anregung bei. Die Positronenerzeugung in s-Wellen und $p\frac{1}{2}$ -Wellen ist ungefähr gleich stark. Trotz der Notwendigkeit, zunächst ein Loch zu erzeugen, ist der Beitrag der innersten gebundenen Zustände am größten. In Stößen nackter Kerne ist die Positronenerzeugung aus dem $1s\sigma$ -Niveau dominant.

Für die Beschreibung von Stößen im überkritischen Bereich ($E_{1s} < -mc^2$) wurde ein Projektionsverfahren zur Zerlegung der Resonanzwellenfunktion in einen gebundenen und einen Kontinuumsanteil entwickelt. Mit dieser Basis wurden wiederum dynamische Rechnungen im gekoppelten-Kanal-Formalismus durchgeführt. Die Ergebnisse weisen darauf hin, daß die Möglichkeit des spontanen Zerfalls des überkritischen Zustands wichtig wird. Wegen der großen Stoßverbreiterung führt aber bei kohärenter Behandlung aller Anregungsprozesse die spontane Positronenerzeugung nur zu quantitativen Beiträgen, nicht zum Auftreten charakteristischer Strukturen im Emissionsspektrum oder in der Anregungsfunktion. Wie wir gesehen haben, kann sich dies in tief inelastischen Kernstößen oberhalb der Coulombbarriere bei sorgfältiger Festlegung der Kinematik drastisch verändern. Anregungen des Elektron-Positron-Feldes in derartigen Stößen können sowohl zur Untersuchung der nuklearen Reaktionszeiten dienen, als auch unter Umständen die Identifizierung der spontanen, energielosen Positronenerzeugung ermöglichen.

Die vorliegenden Resultate stehen zum großen Teil in guter

Übereinstimmung mit den in den letzten drei Jahren durchgeführten Experimenten zur Erzeugung von K-Löchern, Delta-Elektronen und Positronen. Manche der in dieser Arbeit gemachten Näherungen werden sich noch verbessern lassen, wie auch die Genauigkeit und Vielfalt der Messungen noch ausgedehnt werden wird. Schon jetzt läßt sich jedenfalls feststellen, daß Stöße sehr schwerer Ionen ein geeignetes Hilfsmittel zum Studium des Verhaltens von Elektronen in starken äußeren Feldern sind. Weitere Untersuchungen werden zeigen, bis zu welchem Grad die grundlegenden Vorhersagen auf diesem Gebiet (Quantenelektrodynamische Korrekturen für $Z\alpha > 1$, starke Magnetfelder, Kleinsches Paradoxon, geladenes Vakuum) experimentell bestätigt werden können.

Anhang A

Multipolentwicklung der magnetischen Kopplung

Bei der Berechnung der elektronischen Anregungen im Stoß wurde bisher nur das Coulombpotential :

$$V_C(\vec{r}) = \frac{Z_1 |e|}{|\vec{r} - \vec{R}_1(t)|} + \frac{Z_2 |e|}{|\vec{r} - \vec{R}_2(t)|} \quad (1)$$

berücksichtigt. Da die Geschwindigkeit der Kerne für die interessierenden Stöße nahe der Coulombbarriere recht groß wird, $v \approx .1c$, ist das Magnetfeld nicht ohne weiteres vernachlässigbar. Tatsächlich wurde gezeigt⁵⁹⁾, daß der Zeeman-Effekt für das 1s-Niveau in U-U-Stößen bis zu 100 keV, also ca. 10% der Bindungsenergie erreichen kann. Dies führt insbesondere zu einer Spin-Polarisation der erzeugten K-Löcher bzw. δ -Elektronen.¹⁰⁸⁾ In den bisherigen Rechnungen wurde allerdings das Vektorpotential

$$\vec{A}_L(\vec{r}) = \frac{Z_1 |e| \vec{v}_1}{c |\vec{r} - \vec{R}_1(t)|} + \frac{Z_2 |e| \vec{v}_2}{c |\vec{r} - \vec{R}_2(t)|} \quad (2)$$

in Lorentzbeziehung behandelt. Das ist nicht konsistent mit der Festlegung der quasimolekularen Basiszustände, die mit dem Potential (1) in Coulombbeziehung berechnet wurden. In diesem Anhang wollen wir das Vektorpotential in Coulombbeziehung ableiten und nach Multipolen entwickeln. Wir werden allerdings weiterhin die Retardierung vernachlässigen. Nach Ref. 166) sollte deren Einfluß auf das Potential nur sehr gering sein ($\lesssim 0.1\%$).

Ausgehend von der Lorentz-Eichbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_L + \frac{1}{c} \frac{\partial V_L}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

soll durch eine Eichtransformation

$$\begin{aligned} V_C &= V_L - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} , \\ \vec{A}_C &= \vec{A}_L + \vec{\nabla} \Lambda , \end{aligned} \quad (4)$$

das Vektorpotential in Coulomb-Eichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_C = 0 \quad (5)$$

bestimmt werden. Dies führt auf eine inhomogene Wellengleichung für die Eichfunktion

$$\vec{\nabla}^2 \Lambda - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Lambda = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} V_C . \quad (6)$$

Mit dem retardierten Propagator der Wellengleichung

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}', t') = - \frac{1}{4\pi c} \frac{\delta(t + \frac{|\vec{x} - \vec{x}'|}{c} - t')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (7)$$

läßt sich die Lösung schreiben als

$$\Lambda(\vec{x}, t) = - \frac{1}{4\pi c} \int \frac{\frac{\partial V_C}{\partial t'}(\vec{x}', t')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \Big|_{\text{ret}} d^3x' \quad (8)$$

Unter Vernachlässigung der Retardierung folgt mit (1)

$$\Lambda(\vec{x}, t) = - \frac{1}{4\pi c} \sum_{i=1}^2 \int \frac{Z_i |e|}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \frac{\vec{R}_i \cdot (\vec{x}' - \vec{R}_i)}{|\vec{x}' - \vec{R}_i|^3} d^3x' . \quad (9)$$

Das auftretende Volumenintegral läßt sich elementar lösen. Da-

zu substituiert man $\vec{y} = \vec{x}' - \vec{R}_i$ und führt Polarkoordinaten bezüglich der Achse $\vec{x} - \vec{R}_i$ ein. Man erhält

$$\Lambda(\vec{x}, t) = -\frac{|e|}{2c} \sum_{i=1}^2 Z_i \vec{v}_i \cdot \frac{\vec{x} - \vec{R}_i}{|\vec{x} - \vec{R}_i|} \quad (9)$$

Zur Umeichung des Vektorpotentials muß nach (4) der Gradient von Λ gebildet werden:

$$\vec{\nabla} \Lambda(\vec{x}, t) = \frac{|e|}{2c} \sum_{i=1}^2 Z_i \left(-\frac{\vec{v}_i}{|\vec{x} - \vec{R}_i|} + \vec{v}_i \cdot (\vec{x} - \vec{R}_i) \frac{\vec{x} - \vec{R}_i}{|\vec{x} - \vec{R}_i|^3} \right) \quad (10)$$

Das Vektorpotential in Coulomb-Eichung lautet dann

$$\vec{A}_C(\vec{x}, t) = \frac{|e|}{2c} \sum_{i=1}^2 Z_i \left(\frac{\vec{v}_i}{|\vec{x} - \vec{R}_i|} + \vec{v}_i \cdot (\vec{x} - \vec{R}_i) \frac{\vec{x} - \vec{R}_i}{|\vec{x} - \vec{R}_i|^3} \right) \quad (11)$$

Der Betrag von A_C ist um einen Faktor zwischen $\frac{1}{2}$ und 1 kleiner als A_L . Die maximale Winkeldivergenz zwischen den beiden Feldern beträgt $\vartheta = \arccos \frac{2\sqrt{2}}{3} \approx 19.5^\circ$.

Dasselbe Ergebnis (11) wurde in Ref. 167) durch Lösung der Wellengleichung

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A}_C - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}_C}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j}_t \quad (12)$$

mit dem transversalen Strom

$$\vec{j}_t = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \int \frac{\vec{j}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \quad (13)$$

abgeleitet und zur Berechnung der Breit-Wechselwirkung zwischen zwei bewegten Ladungen verwendet. Offenbar ist die Eichkorrektur gegenüber (2) von gleicher Ordnung in v/c wie das Vektorpotential selbst, kann also nicht vernachlässigt werden.

Um die Wirkung des Vektorpotentials zu untersuchen, wird

man am zweckmäßigsten weiterhin von den Lösungen der Zweizentren-Diracgleichung mit dem Potential V_C ausgehen. Die magnetische Kopplung wird dann als Störung behandelt, ebenso wie die $\partial/\partial t$ - Kopplung. Die gekoppelten-Kanal-Gleichungen lauten dann

$$\dot{a}_{ij} = - \sum_k a_{ik} \langle \varphi_j | \frac{\partial}{\partial t} - i|e| \vec{\alpha} \cdot \vec{A} | \varphi_k \rangle e^{-i(\chi_k - \chi_j)} \quad (14)$$

mit der Phase $\chi_k = \int^t dt' \langle \varphi_k | H - |e| \vec{\alpha} \cdot \vec{A} | \varphi_k \rangle$.

Zur Berechnung der Matrixelemente wird die Multipolentwicklung des Vektorpotentials $\vec{A}_L$ benötigt. Wir leiten sie im folgenden für ein symmetrisches System zweier Punktkerne ab.

Das Vektorpotential lautet ($Z = Z_1 = Z_2$)

$$\begin{aligned} \vec{A}_C(\vec{r}, t) &= \frac{Z|e|}{2c} \left(\sum_{i=1}^2 \frac{\vec{v}_i}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} + \sum_{i=1}^2 \frac{(\vec{v}_i \cdot (\vec{r} - \vec{R}_i)) (\vec{r} - \vec{R}_i)}{|\vec{r} - \vec{R}_i|^3} \right) \\ &= \vec{A}_C^{(1)} + \vec{A}_C^{(2)} \end{aligned} \quad (15)$$

mit $\vec{R}_1 = -\vec{R}/2$, $\vec{R}_2 = \vec{R}/2$, $\vec{v}_1 = -\vec{v}/2$, $\vec{v}_2 = \vec{v}/2$ sodaß $\vec{R}(t)$ und $\vec{v}(t)$ der Abstand und die Relativgeschwindigkeit der Kerne sind. Der Koordinatenursprung wird in das geometrische Zentrum des Stoßsystems gelegt. Der Vektor $\vec{v}$ läßt sich in der Stößebeine in eine radiale und eine azimutale Komponente zerlegen

$$\vec{v} = v_R \vec{e}_R + v_\varphi \vec{e}_\varphi \quad (16)$$

mit der radialen Geschwindigkeit $v_R = \dot{R}$ und der Rotationsgeschwindigkeit $v_\varphi = R\dot{\varphi} = v_\omega b / R$.

Der erste Term in (15) liefert dann unter Benutzung der Multipolentwicklung

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \sum_{\ell} \frac{r^{\ell}}{r'^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (17)$$

$$H_{\text{mag}}^{(1)} = -|e| \vec{\alpha} \cdot \vec{A} = -\frac{Ze^2}{2c} (v_R \alpha_R + v_{\varphi} \alpha_{\varphi}) \sum_{\ell=1,3,\dots} \frac{r^{\ell}}{r'^{\ell+1}} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (18)$$

Dabei ist $r_{<} = \min(r, r')$, $r_{>} = \max(r, r')$ sowie $\alpha_R = \vec{\alpha} \cdot \vec{e}_R$, $\alpha_{\varphi} = \vec{\alpha} \cdot \vec{e}_{\varphi}$. θ ist der Polarwinkel zur Verbindungsachse der Kerne (von 1 nach 2). Wegen der vorausgesetzten Symmetrie tragen nur die ungeraden Terme bei.

Die Multipolzerlegung des Eichterms in (15) ist etwas unständlicher. Wir wählen das Koordinatensystem so, daß die Bahn in der x - z -Ebene liegt und die z -Achse mit der Verbindungsachse der Kerne übereinstimmt. Dann gilt

$$H_{\text{mag}}^{(2)} = -\frac{Ze^2}{2c} \frac{\vec{\alpha}}{2} \cdot \left(- (v_{\varphi} x + v_R (z + \frac{R}{2})) \frac{\vec{r} + \vec{R}/2}{|\vec{r} + \vec{R}/2|^3} + (v_{\varphi} x + v_R (z - \frac{R}{2})) \frac{\vec{r} - \vec{R}/2}{|\vec{r} - \vec{R}/2|^3} \right) \quad (19)$$

Es bietet sich also eine Zerlegung von $H_{\text{mag}}^{(2)}$ in zwei Anteile in Richtung $\vec{e}_r$ und $\vec{e}_z$ an (wobei die beiden Komponenten natürlich nicht orthogonal sind). Es gelten die Formeln¹⁶⁸⁾

$$\begin{aligned} \frac{r^2 - a^2}{|\vec{r} - \vec{a}|^3} &= - \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{r^{\ell}}{a^{\ell+1}}, \\ \frac{a - r \cos \theta}{|\vec{r} - \vec{a}|^3} &= \sum_{\ell} (\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{r^{\ell}}{a^{\ell+2}} \quad \text{für } r < a \\ \frac{r^2 - a^2}{|\vec{r} - \vec{a}|^3} &= \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \frac{a^{\ell}}{r^{\ell+1}}, \\ \frac{a - r \cos \theta}{|\vec{r} - \vec{a}|^3} &= - \sum_{\ell} \ell P_{\ell}(\cos \theta) \frac{a^{\ell-1}}{r^{\ell+1}} \quad \text{für } r > a. \end{aligned} \quad (20)$$

Für den Hamiltonoperator der magnetischen Kopplung (19) ergibt sich dann:

$$H_{\text{mag}}^{(2)} = - \frac{Z e^2}{2 c} (\alpha_r F_r + \alpha_z F_z) \quad (21)$$

mit

$$F_r = v_R \frac{r}{R/2} \sum_{\ell=0,2,\dots} \left\{ \begin{matrix} -1 & -1 \\ & 1 \end{matrix} \right\} P_1 (\cos \theta) \frac{r_{<}^1}{r_{>}^{1+1}} + \\ + v_\varphi \frac{1}{r_{>}^2 - r_{<}^2} \frac{r}{R/2} \sum_{\ell=1,3,\dots} (2\ell+1) \frac{x}{r} P_1 (\cos \theta) \frac{r_{<}^{1+1}}{r_{>}^1} \quad (22)$$

und

$$F_z = v_R \sum_{\ell=1,3,\dots} \left\{ \begin{matrix} 1+1 \\ & -1 \end{matrix} \right\} P_1 (\cos \theta) \frac{r_{<}^1}{r_{>}^{1+1}} - \\ - v_\varphi \frac{1}{r_{>}^2 - r_{<}^2} \sum_{\ell=0,2,\dots} (2\ell+1) \frac{x}{r} P_1 (\cos \theta) \frac{r_{<}^{1+1}}{r_{>}^1} \quad (23)$$

wobei die untere (obere) Zeile in den geschweiften Klammern für $R/2 < r$ ($r < R/2$) gilt.

Die scheinbare Divergenz in den v_φ -Termen läßt sich durch Zusammenfassung jeweils zweier aufeinanderfolgender Summanden in der Reihenentwicklung eliminieren. Unter Benutzung von

$$\frac{x}{r} P_1 = \sqrt{2\pi} \sum_{\ell'} \sqrt{2\ell'+1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1' \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (Y_{1',1} - Y_{1',-1}) \quad (24)$$

findet man nach einiger Rechnung

$$F_r = v_R \frac{r}{R/2} \sum_{\ell=0,2,\dots} \left\{ \begin{matrix} -1 & -1 \\ & 1 \end{matrix} \right\} P_1 (\cos \theta) \frac{r_{<}^1}{r_{>}^{1+1}} - \\ - v_\varphi \frac{r}{R/2} \sum_{\ell=1,3,\dots} \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{(1+1)(1+2)}{2(2\ell+3)}} \frac{r_{<}^{1+1}}{r_{>}^{1+2}} (Y_{1+1,1} - Y_{1+1,-1}) \quad (25)$$

und

$$F_Z = v_R \sum_{\ell=1,3,\dots} \left\{ \begin{matrix} 1+1 \\ -1 \end{matrix} \right\} P_1(\cos \theta) \frac{r_{<}^1}{r_{>}^{1+1}} + v_\psi \sum_{\ell=0,2,\dots} \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{(1+1)(1+2)}{2(2\ell+3)}} \frac{r_{<}^{1+1}}{r_{>}^{1+2}} (Y_{1+1,1} - Y_{1+1,-1}) \quad (26)$$

Zur Berechnung der Anregungen durch das Vektorpotential und des Zeeman-Effekts sind demnach die Matrixelemente der Operatoren $A_L(r) \propto_r Y_{LM}$ für gerade L und $A_L(r) \propto_z Y_{LM}$ für ungerade L zu berechnen, wobei $M = -1, 0, +1$.

Betrachten wir zunächst das Matrixelement $\langle \psi'_{\mathcal{X}\mu'} | A_L(r) \alpha_r Y_{LM} | \psi_{\mathcal{X}\mu} \rangle$ mit den Monopol-Dirac-Wellenfunktionen, vgl. (IV.2), (IV.3)

$$\psi_{\mathcal{X}\mu} = \begin{pmatrix} g(r) \chi_{\mathcal{X}}^\mu \\ i f(r) \chi_{\mathcal{X}}^\mu \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Für die Dirac-Matrix in Standarddarstellung

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix} \quad \text{gilt}^{81)} \quad \sigma_r \chi_{\mathcal{X}}^\mu = -\chi_{-\mathcal{X}}^\mu.$$

Nach Ausführen des Skalarprodukts im Spin- und Winkelraum findet man für das Matrixelement

$$\langle \psi'_{\mathcal{X}\mu'} | A_L(r) \alpha_r Y_{LM} | \psi_{\mathcal{X}\mu} \rangle = -i \int_0^\infty r^2 dr A_L(r) [g' f X(l', j', \mu'; l, j, \mu; LM) - f' g X(\bar{l}', j', \mu'; \bar{l}, j, \mu; LM)] \quad (28)$$

mit der Abkürzung

$$X(l', j', \mu'; l, j, \mu; LM) = \sum_m \left(l' \frac{1}{2} j' \middle| \mu' - m m \mu' \right) \left(l \frac{1}{2} j \middle| \mu - m m \mu \right) (-)^{\mu' - m} \sqrt{\frac{(2l'+1)(2l+1)(2L+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ -\mu' + m & \mu - m & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (29)$$

Dabei sind l, j die zu $\mathcal{X}$ und $\bar{l}, j$ die zu $-\mathcal{X}$ gehörigen Werte des Bahn- und Gesamtdrehimpulses nach der Beziehung $\mathcal{X} = l$

für $j = l - 1/2$ und $\mu = -\bar{l} - 1$ für $j = \bar{l} + 1/2$. Die Auswahlregeln für das Matrixelement lauten $\mu' = \mu + M$ und $l' + l + L = 0, 2, 4, \dots$.

Für das andere interessierende Matrixelement ergibt sich mit

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

in ähnlicher Weise

$$\langle \psi_{\mu'} | A_L(r) \alpha_z Y_{LM} | \psi_{\mu} \rangle = i \int_0^\infty r^2 dr A_L(r) [g' f Y(l', j', \mu'; \bar{l}, j, \mu; LM) - f' g Y(\bar{l}', j', \mu'; \bar{l}, j, \mu; LM)] \quad (30)$$

wobei

$$Y(l', j', \mu'; l, j, \mu; LM) = \sum_m \text{sgn } m \begin{pmatrix} l' & \frac{1}{2} j' & \mu' - m \\ m & m & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \frac{1}{2} j & \mu - m \\ m & m & \mu \end{pmatrix} (-)^{\mu' - m} \sqrt{\frac{(2l'+1)(2l+1)(2L+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ -\mu' + m & \mu - m & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Gl. (30) unterscheidet sich also von (28) durch das Signum in der Summe und durch Vertauschung der Drehimpulsquantenzahlen $l, \bar{l}$. Letzteres führt zu der veränderten Auswahlregel $l' + \bar{l} + L = 0, 2, 4, \dots$. Zwischen zwei Zuständen mit guter Drehimpulsquantenzahl (oder auch nur mit guter Parität) kann daher nur jeweils eine der beiden Kopplungen (28), (30) wirksam werden.

Zur Berechnung des Lorentz-Beitrags (18) wird noch das Matrixelement mit $\alpha_\varphi = \alpha_x$ benötigt. Wegen

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

erhält man

$$\langle \Psi_{\mu', \mu'} | A_L(r) \alpha_x Y_{LO} | \Psi_{\mu, \mu} \rangle = i \int_0^\infty r^2 dr A_L(r)$$

$$[g' f Z(l', j', \mu'; \bar{l}, j, \mu; LO) - f' g Z(\bar{l}', j', \mu'; l, j, \mu; LO)] \quad (32)$$

mit

$$Z(l', j', \mu'; l, j, \mu; LO) = \sum_m (l' \frac{1}{2} j' | \mu' + m -m \mu') (l \frac{1}{2} j | \mu -m m \mu) \\ (-)^{\mu' + m} \sqrt{\frac{(2l' + 1)(2l + 1)(2L + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ -\mu' - m & \mu - m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & l & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

Dieses Matrixelement existiert also nur zwischen Zuständen mit $\mu' = \mu \pm 1$.

Zum Abschluß betrachten wir die magnetischen Kopplungen zwischen s-Zuständen in Monopolnäherung. Hier ist $j = 1/2$, $l = 0$, $\bar{l} = 1$ und die benötigten Drehimpuls-Koeffizienten lauten

$$X(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 00) = X(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 00) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = Y(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = -\sqrt{\frac{1}{3}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = -Y(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Z(0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = -Z(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 10) = \sqrt{\frac{1}{3}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

Durch Einsetzen dieser Werte findet man, daß sich die Beiträge zur Kopplung zwischen s-Zuständen mit gleicher magnetischer Quantenzahl gerade wegheben, also

$$\langle s' \uparrow | H_{\text{mag}} | s \uparrow \rangle = 0. \quad (34)$$

In Lorentzzeichnung würde dieser Term nicht verschwinden. Er lautete vielmehr

$$\langle s' \uparrow | H_{\text{mag}}^{\text{Lorentz}} | s \uparrow \rangle = \frac{Ze^2}{c} \frac{1}{3} v_R \int_0^\infty r^2 dr \frac{r_{<}}{r_{>}^2} (g' f - f' g). \quad (35)$$

Wegen der Differenz im Integranden wirkt die Kopplung nur zwischen Zuständen mit unterschiedlicher radialer Wellenfunktion. Da sie innerhalb einer Schale verschwindet, trägt (35) zur Zeeman-Aufspaltung nichts bei.

Für Übergänge mit Spin-Flip ergibt sich das einfache Resultat

$$\langle s' \downarrow | H_{\text{mag}} | s \uparrow \rangle = \frac{Ze^2}{c} \frac{1}{3} v_\varphi \int_0^\infty r^2 dr \frac{r_{<}}{r_{>}^2} (g' f + f' g). \quad (36)$$

Das ist genau das Ergebnis, welches man auch in Lorentzzeichnung erhält.

Anhang B

Beschreibung von Vielteilchenanregungen mittels Slater-determinanten

In Kap. III wurde gezeigt, wie sich das Vielteilchenproblem in einfacher Weise auf die Verwendung von Einelektronenwellenfunktionen reduzieren läßt, vorausgesetzt man vernachlässigt die Zweiteilchenwechselwirkung im Hamiltonoperator. Während dort der Formalismus der zweiten Quantisierung benutzt wurde sollen die entsprechenden Resultate hier noch einmal unter Verwendung von Slaterdeterminanten abgeleitet werden. Wir folgen dabei der Arbeit von Reading et al.⁷⁴⁾.

Ausgangspunkt ist wieder die Basis der Zustände Φ_i , welche die zeitabhängige Einteilchen-Diracgleichung (II.4) mit definierter Randbedingung bei $t = -\infty$ erfüllen. Eine antisymmetrisierte Wellenfunktion für N Elektronen läßt sich als Slaterdeterminante

$$\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\Phi_1(\vec{r}_1) \dots \Phi_N(\vec{r}_N)) \quad (1)$$

schreiben (wobei der Kürze halber die Zustände 1 bis N als ursprünglich besetzt angenommen wurden), wenn der Hamiltonoperator keine Wechselwirkung zwischen den Elektronen enthält. Durch Projektion auf die Wellenfunktion

$$\chi_G(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\varphi_{G_1}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{G_N}(\vec{r}_N)) \quad (2)$$

läßt sich die Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$A_G = \langle \chi_G | \Phi \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \varphi_{G_1}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{G_N}(\vec{r}_N) | \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rangle \quad (3)$$

dafür erhalten, daß die Elektronen in der Konfiguration $\mathcal{G} = (\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2, \dots, \mathcal{G}_N)$ von adiabatischen Wellenfunktionen vorliegen. In (3) kann auf die Antisymmetrisierung von $\chi_{\mathcal{G}}$ verzichtet werden, da $\mathcal{A}^+ \mathcal{A} = \mathcal{A} \mathcal{A} = \mathcal{A}$ wenn $\mathcal{A}$ der Antisymmetrisierungsoperator ist. Um nun Aussagen über die Besetzung einzelner Niveaus machen zu können, muß über verschiedene Konfigurationen summiert werden. Beispielsweise ist die Wahrscheinlichkeit für ein Loch im Zustand q :

$$P_q = \sum_{\mathcal{G}} |A_{\mathcal{G}}|^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{G}} \int \prod_{i=1}^N dr_i' \prod_{j=1}^N dr_j \phi(\vec{r}_1', \dots, \vec{r}_N') \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \varphi_{\mathcal{G}_1}^*(\vec{r}_1') \dots \varphi_{\mathcal{G}_N}^*(\vec{r}_N') \cdot \varphi_{\mathcal{G}_1}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\mathcal{G}_N}(\vec{r}_N) \quad (4)$$

wobei über alle Konfigurationen $\mathcal{G}$ summiert wird, die den Zustand q nicht enthalten. Die $\mathcal{G}_i$ dürfen also alle Werte außer q durchlaufen, sie können unabhängig behandelt werden, da Kombinationen mit Wiederholung nichts beitragen. Unter Benutzung der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_i \varphi_i^*(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (5)$$

reduziert sich (4) auf

$$P_q = \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N dr_i' \prod_{j=1}^N dr_j \phi(\vec{r}_1', \dots, \vec{r}_N') \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \prod_{k=1}^N (\delta(\vec{r}_k' - \vec{r}_k) - \varphi_q^*(\vec{r}_k') \varphi_q(\vec{r}_k)) \quad (6)$$

Es läßt sich zeigen, daß die Terme, in denen Produkte der Art

$\varphi_q^*(\vec{r}_k') \varphi_q(\vec{r}_k) \varphi_q^*(\vec{r}_1') \varphi_q(\vec{r}_1)$ auftreten, verschwinden, da dann eine in $k, 1$ symmetrische Wellenfunktion auf das vollständig antisymmetrische Φ projiziert wird, was Null ergibt.

Es bleiben also nur zwei Beiträge übrig, nämlich

$$\frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N dr_i \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 1$$

und

$$- \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{i=1}^N dr_i \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi_q(\vec{r}_1) \dots \varphi_q(\vec{r}_k) \dots \phi_N(\vec{r}_N) \cdot \\ \cdot \int dr_k' \varphi_q^*(\vec{r}_k') \phi_k(\vec{r}_k') = - |\langle \varphi_q | \phi_k \rangle|^2$$

Also ist die Lochwahrscheinlichkeit

$$P_q = 1 - \sum_{k \in F} |\langle \varphi_q | \phi_k \rangle|^2 = 1 - \sum_{k \in F} |a_{kq}|^2 = \sum_{k \notin F} |a_{kq}|^2. \quad (7)$$

Das ist das alte Ergebnis aus Gl. (3.16).

Ebenso läßt sich die Wahrscheinlichkeit aus Gl. (3.21) für korrelierte Teilchen-Loch-Paare p, q ableiten⁷⁴⁾. Im Unterschied zur obigen Rechnung wird hierbei über alle Konfigurationen $\mathcal{G}$ mit $p \in \mathcal{G}$ und $q \notin \mathcal{G}$ summiert:

$$P_{pq} = \sum_{\mathcal{G}} |A_{\mathcal{G}}|^2 = \frac{1}{N!} \int \prod_{i=1}^N dr_i \cdot \prod_{j=1}^N dr_j \phi(\vec{r}_1', \dots, \vec{r}_N') \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \cdot \\ \cdot \sum_{\lambda} \varphi_p^*(\vec{r}_1') \varphi_p(\vec{r}_1) \prod_{k \neq \lambda}^N (\delta(\vec{r}_k' - \vec{r}_k) - \varphi_q^*(\vec{r}_k') \varphi_q(\vec{r}_k)) \quad (8)$$

Wiederum gibt es beim Ausführen des Produktes über k nur zwei Beiträge, nämlich

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{i=1}^N dr_i \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi_1(\vec{r}_1) \dots \varphi_p(\vec{r}_1) \dots \phi_N(\vec{r}_N) \cdot \\ \cdot \int dr_1' \varphi_p^*(\vec{r}_1') \varphi_1(\vec{r}_1') = \langle \phi_1 | \varphi_p \rangle \langle \varphi_p | \phi_1 \rangle$$

und

$$- \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{j=1}^N dr_j \phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \phi_1(\vec{r}_1) \dots \varphi_q(\vec{r}_1) \dots \varphi_p(\vec{r}_1) \dots \phi_N(\vec{r}_N) \cdot \\ \cdot \langle \varphi_p | \phi_1 \rangle \langle \varphi_q | \phi_1 \rangle =$$

$$= -\langle \varphi_p | \phi_l \rangle \langle \varphi_q | \phi_i \rangle \begin{vmatrix} \langle \phi_i | \varphi_q \rangle & \langle \phi_i | \varphi_p \rangle \\ \langle \phi_l | \varphi_q \rangle & \langle \phi_l | \varphi_p \rangle \end{vmatrix},$$

wobei über alle i und $l \leq N$ zu summieren ist. Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned} P_{pq} &= \sum_{l < F} |a_{lq}|^2 - \sum_{i, l < F} a_{lp} a_{iq} (a_{iq}^* a_{lp}^* - a_{ip}^* a_{lq}^*) \\ &= \sum_{l < F} |a_{lq}|^2 (1 - \sum_{i < F} |a_{ip}|^2) - \left| \sum_{l < F} a_{lq}^* a_{lp} \right|^2 \end{aligned} \quad (9)$$

in Übereinstimmung mit dem Resultat in Kap. III. Interessiert man sich für kompliziertere Korrelationen von m Teilchen und/oder Löchern, so wird man auf m -reihige Determinanten aus den Amplituden geführt.

Anhang C

Symmetrisierung der Positronenwahrscheinlichkeiten

Im Experiment werden nicht die stoßparameterabhängigen Wahrscheinlichkeiten $P(b)$ gemessen, sondern differentielle Wirkungsquerschnitte $d\sigma/d\Omega$ über dem Streuwinkel. Wenn zwischen Projektil- und Targetteilchen - in symmetrischen Systemen ist dies prinzipiell nicht möglich - nicht unterschieden wird, muß der theoretische Streuquerschnitt symmetrisiert werden. In Übereinstimmung mit der Annahme einer klassischen Bahnbewegung addieren wir die Beiträge von zwei Stößen inkohärent. Der quantenmechanische Interferenzterm sollte wegen des hohen Sommerfeldparameters η keine Rolle spielen. Wir unterscheiden:

Stoß 1 : Das Projektilteilchen mit Masse m_1 wird unter dem Laborwinkel θ_1^L beobachtet. Zugehöriger Schwerpunktswinkel θ_1' , Stoßparameter b_1 .

Stoß 2 : Das Targetteilchen mit Masse m_2 wird unter dem Laborwinkel θ_2^L beobachtet. Zugehöriger Schwerpunktswinkel θ_2' , Stoßparameter b_2 .

Der Stoßparameter errechnet sich dabei aus

$$b_i = a \sqrt{\frac{1}{\sin^2 \theta_i'/2} - 1} . \quad (1)$$

Der Zusammenhang zwischen Schwerpunktswinkel und Laborwinkel lautet (vgl. etwa Ref. 169)):

$$\theta_1' = \theta_1^L + \arcsin \left(\frac{m_1}{m_2} \sin \theta_1^L \right) , \quad (2)$$

$$\theta_2' = \pi - 2 \theta_2^L \quad . \quad (3)$$

Falls ein schwereres Projektil benutzt wird, $m_1 > m_2$, ist die Funktion (2) nicht mehr eindeutig. Nahe Stöße mit großem Schwerpunktswinkel θ_1' führen in diesem Fall wieder zu kleinen Laborwinkeln θ_1^L . Da das Projektil dabei einen hohen Energieverlust erleidet, wird dieser Zweig im folgenden vernachlässigt.

Den Positronenquerschnitt im Laborsystem erhält man durch Addition der Beiträge beider Stöße mit $\theta_1^L = \theta_2^L = \theta_L$:

$$\frac{d\sigma^{e^+}}{d\Omega}(\theta_L) = \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_1 P^{e^+}(b_1) + \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_2 P^{e^+}(b_2) \quad (4)$$

mit

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_1 = \frac{d\sigma^R}{d\Omega'}(\theta_1') \frac{\left(\frac{m_1}{m_2} \cos \theta_L + \sqrt{1 - \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^2 \sin^2 \theta_L} \right)^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{m_1}{m_2} \right)^2 \sin^2 \theta_L}} \quad (5)$$

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_2 = \frac{d\sigma^R}{d\Omega'}(\theta_2') \cdot 4 \cos \theta_L \quad . \quad (6)$$

Dabei ist

$$\frac{d\sigma^R}{d\Omega'}(\theta') = \frac{a^2}{4} \frac{1}{\sin^4(\theta'/2)} \quad (7)$$

der elastische (Rutherford-) Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem.

Die Erzeugungswahrscheinlichkeiten in Fig. 35) - 38) wurden aus dem Verhältnis von Positronenquerschnitt (4) und elastischem Streuquerschnitt im Laborsystem berechnet

$$P_{\text{lab}}^{e^+}(\theta_L) = \frac{d\sigma^{e^+}}{d\Omega}(\theta_L) / \left(\left. \frac{d\sigma^R}{d\Omega} \right|_1 + \left. \frac{d\sigma^R}{d\Omega} \right|_2 \right) \quad (8)$$

und für Fig. 36) , 38) über einen Winkelbereich $\theta_L^{\min} \dots \theta_L^{\max}$ gemittelt:

$$\overline{P_{\text{lab}}^{e+}} = \frac{\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} P_{\text{lab}}^{e+}(\theta_L) \sin \theta_L d\theta_L}{\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \sin \theta_L d\theta_L} . \quad (9)$$

In Fig. 35) wurde $P_{\text{lab}}^{e+}(\theta_L)$ über dem Streuwinkel θ_1' im Schwerpunktssystem aufgetragen, der bei Beobachtung des Projektilteilchens gilt.

Da der Rutherfordquerschnitt mit dem Stoßparameter stark ansteigt, dominiert bei nicht zu großem θ_L der Beitrag des "Vorwärtsstoßes" .

Literaturverzeichnis

- 1) B. Müller: Ann. Rev. Nucl. Sci. 26, 351 (1976)
- 2) J. Reinhardt, W. Greiner:
Rep. Prog. Phys. 40, 219 (1977)
- 3) J. Rafelski, L.P. Fulcher, and A. Klein: Phys. Rep.
38C, 227 (1978)
- 4) S.J. Brodsky and P.J. Mohr in:
Structure and Collisions of Ions and Atoms,
ed. I. A. Sellin, Berlin, Heidelberg, New York:
Springer, 1978, p. 3
- 5) P.A.M. Dirac:
Proc. Roy. Soc. (London) A126, 360 (1930)
- 6) I. Pomeranchuk and J. Smorodinsky:
J. Phys. USSR 9, 97 (1945)
- 7) F.G. Werner and J.A. Wheeler:
Phys. Rev. 109, 126 (1958)
- 8) V.V. Voronkov and N.N. Koleznikov:
Sov. Phys. JETP 12, 136 (1961)
- 9) W. Pieper and W. Greiner: Z. Physik 218, 126 (1969)
- 10) G. Soff, B. Müller, and J. Rafelski:
Z. Naturforschung 29a, 1267 (1974)
- 11) A. B. Migdal: Sov. Phys. JETP 43, 211 (1976)
- 12) S.S. Gershtein and Y.B. Zeldovich:
Sov. Phys. JETP 30, 358 (1970)
- 13) B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 28, 1235 (1972)
- 14) B. Müller, J. Rafelski, and W. Greiner:
Z. Physik 257, 62 and 183 (1972)
- 15) Y. B. Zeldovich and V.S. Popov:
Soviet Phys. Usp. 14, 673 (1972)
- 16) J. Rafelski, B. Müller, and W. Greiner:
Nucl. Phys. B 68, 585 (1974)
- 17) L.P. Fulcher and A. Klein: Phys. Rev. D8, 2455 (1973)
- 18) J. Rafelski, L.P. Fulcher, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 27, 958 (1971);
J. Rafelski, W. Greiner, and L.P. Fulcher:

- Nuovo Cim. 13 B, 135 (1973)
- 19) G. Soff, J. Rafelski, and W. Greiner:
Phys. Rev. A7, 903 (1973)
- 20) G.A. Rinker and L. Wilets:
Phys. Rev. Lett. 31, 1559 (1973)
- 21) M. Gyulassy: Phys. Rev. Lett. 33, 921 (1974)
- 22) K.-T. Cheng and W.R. Johnson:
Phys. Rev. A 14, 1943 (1976)
- 23) O. Klein: Z. Physik 53, 157 (1929)
- 24) F. Hund: Z. Physik 117, 1 (1941)
- 25) F. Beck, H. Steinwedel und G. Süssmann:
Z. Physik 171, 189 (1963)
- 26) F. Sauter: Z. Physik 69, 742 (1931)
- 27) J. Rafelski, L.P. Fulcher, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 27, 958 (1971)
- 28) B. Müller, J. Rafelski, and W. Greiner:
Phys. Lett. 47 B, 5 (1973)
- 29) B. Müller and W. Greiner:
Z. Naturforsch. 31a, 1 (1976)
- 30) J. Rafelski and B. Müller :
Phys. Lett. 65B, 205 (1976)
- 31) V.I. Lisin, M.S. Marinov, and V.S. Popov:
Phys. Lett. 69B, 141 (1977)
und ältere Arbeiten dieser Autoren
- 32) H. Peitz, B. Müller, J. Rafelski, and W. Greiner:
Lett. Nuovo Cim. 8, 37 (1973)
- 33) S.S. Gershtein and V.S. Popov:
Lett. Nuovo Cim. 6, 593 (1973);
V.S. Popov: Sov. Phys. JETP 38, 18 (1974);
V.S. Popov: Sov. J. Nucl. Phys. 19, 81 (1974);
M.S. Marinov and V.S. Popov:
Sov. J. Nucl. Phys. 20, 641 (1975)
- 34) G. Soff, J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 38, 592 (1977)
- 35) W. Heitler and L. Nordheim: J. d. Phys. 5, 449 (1934)
- 36) W.B. Berestetzki, E. M. Lifschitz und
L.P. Pitajewski: Relativistische Quantentheorie,
Akademie-Verlag: Berlin, 1971
- 37) J. Bang and J.M. Hansteen:

- Kgl. Dan. Vid. Selsk.,
Mat. Fys. Medd. 31,no. 13 (1959)
- 38) W.E. Stephens and H. Staub:
Phys. Rev. 109,1196 (1958)
- 39) K. Smith, H. Peitz, B. Müller, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 32, 554 (1974)
- 40) D.H. Jakubassa and M. Kleber:
Z. Physik A277, 41 (1976);
D.H. Jakubassa: Phys. Lett. 58A (1976)
- 41) N.S. Mott and H.S.W. Massey:
The Theory of Atomic Collisions,3rd Ed.,Oxford, 1965
- 42) E. Merzbacher and H.W. Lewis in:
Handbuch der Physik (S. Flügge Hrsg.) Bd. 34,
Berlin, 1958, s. 166
- 43) D.H. Madison and E. Merzbacher in:
Atomic Inner-Shell Processes (B. Crasemann, ed.),
Vol. I, New York, 1975 , p. 1
- 44) J.S. Briggs: Rep. Prog. Phys. 39, 217 (1976)
- 45) B.L. Moiseiwitsch: Rep. Prog. Phys. 40, 843 (1977)
- 46) W.E. Meyerhof and K. Taulbjerg:
Ann. Rev. Nucl. Sci. 27, 279 (1977)
- 47) N. Bohr: Kgl. Dan. Vidensk. Selsk.,
Mat. Fys. Medd. 18,1 (1948)
- 48) K. Smith, B. Müller, and W. Greiner:
J. Phys. B8 ,75 (1975)
- 49) U. Heinz: Dissertation, Universität Frankfurt, 1979
- 50) K. Alder, A. Bohr, T. Huus, B. Mottelson, and
A. Winther: Rev. Mod. Phys. 28, 432 (1956)
- 51) J.M. Hansteen: Adv. At. Mol. Phys. 11,299 (1975)
- 52) L. Kocbach, J.M. HANSTEEN, AND R. Gundersen,:
University of Bergen, Norway, Scientific Report No.
114, 1979, to appear in Nucl. Inst. Meth.
- 53) J. Rafelski, B. Müller, and W. Greiner:
Lett. Nuovo Cim 4, 469 (1972)
- 54) H.S.W. Massey and R.A. Smith:
Proc. Roy. Soc. A142,142 (1933)
- 55) D.R. Bates, H.S.W. Massey,and R. Stewart:
Proc. Roy. Soc. (London) A 216, 437 (1953)
- 56) W.R. Thorson and H. Levy II:

- Phys. Rev. 181, 230 (1969)
- 57) W.R. Thorson: Phys. Rev. A12, 1365 (1975)
- 58) U. Fano and W. Lichten:
Phys. Rev. Lett. 14, 627 (1965)
- 59) J. Rafelski and B. Müller:
Phys. Rev. Lett. 36, 517 (1976)
- 60) J.S. Briggs: J. Phys. B8, L485 (1975)
- 61) D.R. Bates and R. McCarroll:
Proc. Roy. Soc. (London) A245, 311 (1958)
- 62) W.R. Thorson and J.B. Delos:
Phys. Rev. A18, 117 (1978)
- 63) G.B. Schmid: Phys. Rev. A15, 1459 (1977)
- 64) S.B. Schneidermann and A. Russek:
Phys. Rev. 181, 311 (1969)
- 65) H. Levy II and W.R. Thorson:
Phys. Rev. 181, 244 and 252 (1969);
- 66) Ch. Lebeda, W.R. Thorson, and H. Levy II:
Phys. Rev. A4, 900 (1971)
- 67) T.A. Green: Proc. Phys. Soc. 86, 1017 (1965)
- 68) R. Shakeshaft, J. Macek, and E. Gerjuoy:
J. Phys. B6, 794 (1973)
- 69) J. Theis: Diplomarbeit, Frankfurt, 1978
- 70) J. Schwinger: Phys. Rev. 91, 713 (1953)
- 71) J. Kirsch, B. Müller, and W. Greiner: Unified Theory
of Electrons and Photons in Heavy-Ion Collisions,
preprint, Frankfurt, 1979
- 72) J.F. Reading: Phys. Rev. A8, 3262 (1973)
- 73) J.H. McGuire and L. Weaver: Phys. Rev. A16, 41 (1977)
- 74) J.F. Ford and A.L. Reading :
Texas A&M University preprint, 1978
- 75) L.D. Landau and E.M. Lifschitz:
Statistische Physik,
Akademie-Verlag, Berlin, 1969
- 76) B. Müller, Dissertation, Frankfurt 1973
- 77) W. Betz, Dissertation, Frankfurt, 1980
- 78) G. Soff, W. Betz, J. Reinhardt, and J. Rafelski:
Physica Scripta 17, 417 (1978)
- 79) G. Poots, U. Öpik, and D.R. Bates:
Proc. Phys. Soc. (London) A66, 1113 (1953)

- 80) A.I. Akhiezer and N.B. Berestetskii:
Quantum Electrodynamics,
New York: Interscience, 1965
- 81) M.E. Rose: Relativistic Electron Theory,
New York: Wiley, 1961
- 82) H. Peitz: Diplomarbeit, Frankfurt, 1977
- 83) B. Müller, J. Rafelski, and W. Greiner:
Nuovo Cim. A18, 551 (1973)
- 84) Es wurden Computerprogramme von G. Soff verwendet,
siehe auch G. Soff: Dissertation, Frankfurt, 1977
- 85) G. Soff, W. Greiner, W. Betz, and B. Müller:
Phys. Rev. A 20, 169 (1979)
- 86) J. Theis, J. Reinhardt, and B. Müller:
J. Phys. B12, L479 (1979)
- 87) D.H. Jakubassa: Z. Physik A290, 13 (1979)
- 88) U. Fano: Phys. Rev. 124, 1866 (1961)
- 89) L. Fulcher and A. Klein: Ann. Phys. 84, 335 (1974)
- 90) W.L. Wang and C.M. Shakin:
Phys. Lett. 32B, 421 (1970)
- 91) M. Micklinghoff: Dissertation, Hamburg, 1977;
M. Micklinghoff: Nucl. Phys. A295, 228 (1978)
- 92) N. Auerbach, J. Hüfner, A.K. Kerman, and C.M. Shakin:
Rev. Mod. Phys. 44, 48 (1972)
- 93) W.L. Wang and C.M. Shakin: Phys. Rev. C5, 1898 (1972)
- 94) H.W. Barz, I. Rotter, and J. Höhn:
Phys. Lett. 37B, 4 (1971)
- 95) I. Rotter, H.-W. Barz, R. Wünsch, and J. Höhn:
Particles and Nucleus (USSR) 6, 435 (1975)
- 96) H. Feshbach: Ann. Phys. (N.Y.) 19, 287 (1962)
- 97) F.S. Levin and H. Feshbach:
Reaction Dynamics, New York: Gordon and Breach, 1973
- 98) B.H. Bransden: Atomic Collision Theory, New York:
Benjamin, 1970
- 99) M. Gyulassy: Nucl. Phys. A244, 497 (1975)
- 100) R. Courant and D. Hilbert:
Methoden der mathematischen Physik, Springer:
Berlin, 1968
- 101) A. Sandulescu, I. Silisteanu, and R. Wünsch:
Nucl. Phys. A305, 205 (1978)

- 102) W. Betz, G. Soff, B. Müller, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 37, 1046 (1976)
- 103) G. Soff, W. Betz, B. Müller, W. Greiner,
and E. Merzbacher:
Phys. Lett. 65A, 19 (1978)
- 104) G. Soff, B. Müller, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 40, 540 (1978)
- 105) G. Soff, B. Müller, and W. Greiner:
GSI-Bericht M-5-78 (1978)
- 106) J. Reinhardt, V. Oberacker, B. Müller, W. Greiner
and G. Soff: Phys. Lett. 78B, 183 (1978)
- 107) J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner in:
Coherence and Correlation in Atomic Collisions
(H. Kleinpoppen, ed.),
New York: Plenum, 1979, p. 331
- 108) W. Greiner, B. Müller, and G. Soff:
Phys. Lett. 69A, 27 (1978)
- 109) T.H. Rihan, N.S. Aly, E. Merzbacher, B. Müller,
and W. Greiner: Z. Physik A285, 397 (1978)
- 110) B. Fricke and G. Soff:
Atomic Data and Nuclear Data Tables 19, 83 (1978)
- 111) J.C. Slater: Phys. Rev. 36, 57 (1930)
- 112) W. Schäfer and G. Soff: Nuovo Cim. 31B, 250 (1976)
J. Rafelski: Phys. Rev. C13, 2086 (1976)
- 113) P. Armbruster and P. Kienle:
Z. Physik A291, 399 (1979)
- 114) P. Armbruster, H.-H. Behncke, S. Hagmann, D. Liesen,
F. Folkmann, and P.H. Mokler:
Z. Physik A288, 277 (1978)
- 115) J. Bang and J.M. Hansteen:
Phys. Lett. 72A, 218 (1979)
- 116) B. Müller, G. Soff, W. Greiner, and V. Ceaulescu:
Z. Physik A 285, 27 (1978)
in Gl. (8) fehlt ein Faktor $(4R_0 mc^2 / \hbar v)^{\gamma-1}$,
Fig. 2 bis 4 ändern sich entsprechend
- 117) C. Foster, T. Hoogkamer, P. Woerlee, and F.W. Saris:
J. Phys. B9, 1943 (1976)
- 118) W.E. Meyerhof: Phys. Rev. A10, 1005 (1974)
- 119) D. Burch, W.B. Ingalls, H. Wieman,

and R. Vandenbosch:

Phys. Rev. A10, 1254 (1974)

- 120) R. Anholt, Phys. Rev. A17, 983 (1978)
- 121) V. Oberacker: Dissertation, Frankfurt, 1977
- 122) J.S. Greenberg, H. Bokemeyer, E. Emling, E. Grosse,
D.Schwalm, and F. Bosch:
Phys. Rev. Lett. 39, 1404 (1977)
- 123) D. Liesen, P. Armbruster, H.-H. Behncke,
and S. Hagmann:
Z. Physik A288, 417 (1978)
- 124) J.R. MacDonald, P. Armbruster, H.-H. Behncke,
F. Folkmann, S. Hagmann, D. Liesen, P.H. Mokler,
and A. Warczak: Z. Physik A284, 57 (1978)
- 125) H.-H. Behncke, D. Liesen, S. Hagmann, P.H. Mokler,
and P. Armbruster: Z. Physik A288, 35 (1978)
- 126) R. Anholt and W.E. Meyerhof:
Phys. Lett. 64A, 381 (1978)
- 127) R. Anholt, W.E. Meyerhof, and Ch. Stoller:
Z. Physik A291, 287 (1979)
- 128) C. Kozhuharov, P. Kienle, D. Jakubassa,
and M. Kleber:
Phys. Rev. Lett. 39, 540 (1977)
- 129) F. Bosch, H. Krimm, B. Martin, B. Povh,
K. Traxel, and Th. Walcher:
Phys. Lett. 78B, 568 (1978)
- 130) H. Backe, L. Handschug, F. Hessberger, E. Kankleit,
L. Richter, F. Weik, R. Willwater, H. Bokemeyer,
P. Vincent, Y. Nakayama, and J.S. Greenberg:
Phys. Rev. Lett. 40, 1443 (1978)
- 131) C. Kozhuharov, P. Kienle, E. Berdermann, H.
Bokemeyer, J. S. Greenberg, Y. Nakayama, P. Vincent,
H. Backe L. Handschug, and E. Kankleit:
Phys. Rev. Lett. 42, 376 (1979)
- 132) D. Liesen, P. Armbruster, H.-H. Behncke, F. Bosch,
S. Hagmann, P.H. Mokler, H. Schmidt-Böcking,
and R. Schuch:
Intermediate Superheavy Atomic Collision Systems -
Experiments at the UNILAC, preprint, 1979
- 133) J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner, and G. Soff:

- Phys. Rev. Lett. 43, 1307, (1979)
- 134) N. Bohr: Phys. Rev. 58, 654 (1940)
- 135) P.A. Amundsen: J. Phys. B11, L737 (1978)
- 136) G. Soff, J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner:
wird veröffentlicht in Z. Physik A
- 137) K.-H. Wietschorke, B. Müller, W. Greiner, G. Soff:
J. Phys. B12, L31 (1979)
- 138) E. Kankeleit: Positrons from Heavy Ion Collisions,
Proceedings of the Intern. Conf.
on Nuclear Interactions,
Canberra (Australia) 1979
- 139) H. Bokemeyer: Atomic Physics with very heavy Ions,
GSI-Report 79-4, 1979
- 140) H. Backe, W. Bonin, W. Engelhardt, E. Kankeleit,
M. Mütterer, P. Senger, F. Weik, R. Willwater,
V. Metag, and J.B. Wilhelmy:
Positron Production in Heavy Ion Collisions,
preprint, 1979
- 141) K.G. Kaun, S.A. Karamyan:
JINR preprint P7-11420, Dubna(1978)
- 142) P. Schlüter, G. Soff, and W. Greiner:
Z. Physik A286, 149 (1978)
- 143) V. Oberacker, G. Soff, and W. Greiner:
Phys. Rev. Lett. 36, 1024 (1976);
V. Oberacker, G. Soff, and W. Greiner:
Nucl. Phys. A259, 324 (1976)
- 144) W.E. Meyerhof, R. Anholt, Y. El Masry, I.Y. Lee,
D. Cline, F.S. Stephens, and R.M. Diamond:
Phys. Lett. 69B, 41 (1977)
- 145) J. Rafelski, B. Müller, and W. Greiner:
Z. Physik A285, 49 (1978)
- 146) siehe z.B.
A. Gobbi and D.A. Bromley in R. Bock:
Heavy Ion Collisions Vol. I, Amsterdam:
North Holland, 1979, p. 485
- 147) M. Lefort: J. Physique 37, Colloq. C5, 57 (1976)
- 148) W.U. Schroeder, J.R. Birkelund, J.R. Huizenga,
and K.L. Wolf: Phys. Reports C45, 301 (1978)
- 149) G. Wolschin: Fizika 9, Suppl. 4, 513 (1977)

- 150) C. Riedel, G. Wolschin, and W. Nörenberg:
Z. Physik A 290, 47 (1979)
- 151) K.E. Rehm, H. Essel, K. Hartel, P. Kienle,
H. J. Körner and W. Wagner:
Phys. Lett 86B, 251 (1979)
- 152) S. Yamaji, W. Scheid, H.J. Fink, and W. Greiner:
J.Phys. G2, L189 (1976)
- 153) R.M. Eisberg, D.R. Yennie, and D.H. Wilkinson:
Nucl.Phys. 18, 338 (1960)
- 154) H. Feshbach and D.R. Yennie:
Nucl. Phys. 37, 150 (1962)
- 155) J. Reinhardt, Diplomarbeit, 1975
- 156) C. Maroni, I. Massa, and G. Vannini:
Nucl. Phys. A273, 429 (1976)
- 157) G. Ciocchetti, A. Molinari, and R. Malvano:
Nuovo Cim. 29, 1262 (1963)
G. Ciocchetti and A. Molinari:
Nuovo Cim 40B, 69 (1965)
- 158) R. Anholt: Electronic $1s\sigma^-$ vacancy Production in
deep-inelastic nuclear reactions,
Stanford preprint, 1979
- 159) J.F. Chemin, S. Andriamonje, J. Rotutier,
J.P. Thibaud, S. Joly, and J. Uzureau:
Proc. of the 11th. Int. Conf on Physics of
Electronic and Atomic Collisions, Kyoto, 1979
- 160) J.S. Blair, P. Dyer, K.A. Snover, and T.A. Trainor:
Phys. Rev. Lett. 41, 1712 (1978)
- 161) S. Röhl, S. Hoppenau, and M. Dost:
Phys. Rev. Lett. 43, 1300 (1979)
- 162) J. Reinhardt , B. Müller, W. Greiner, and G. Soff:
Z. Physik A292, 123 (1979)
- 163) R. Anholt: Z. Physik A292, 123 (1979)
- 164) G. Soff, J. Reinhardt, B. Müller, and W. Greiner:
wird veröffentlicht in Phys. Rev. Lett.
- 165) U. Müller, Diplomarbeit, Frankfurt, 1980
- 166) D. Kolb, W.-D. Sepp, B. Fricke, and T. Morovic:
Z. Physik A286, 169 (1978)
- 167) J.D. Jackson: Classical Electrodynamics, New York:
Wiley 1962, p.409

- 168) G. Arfken: Mathematical Methods for Physicists,
New York: Academic Press, 1970, p. 545
- 169) J.B. Marion:
Classical Dynamics of Particles and Systems,
New York: Academic Press, 1965

Lebenslauf

Am 13. 12. 1952 wurde ich als Sohn von Hans und Elfriede Reinhardt in Königstein/Taunus geboren. Ich wuchs in Kronberg auf und besuchte die dortige Volksschule. Seit dem Jahr 1962 wohne ich in Kelkheim/Taunus, wo ich zunächst die Pestalozzi-Schule besuchte. Anschließend ging ich auf die Taunusschule/Gymnasium in Königstein und legte dort im Juni 1971 das Abitur ab. Seit Oktober 1971 studierte ich an der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität, Frankfurt, wo ich im Oktober 1973 die Diplom-Vorprüfung ablegte. Im Juni 1975 bestand ich die Diplom-Hauptprüfung in Physik mit Auszeichnung. Seitdem bin ich im Institut für Theoretische Physik als wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig.

Meine akademischen Lehrer waren: Prof. F. W. Bauer, Prof. F. Constantinescu, Dr. A. Doiwa, Prof. T. Elze, Prof. U. Gerhardt, Prof. W. Greiner, Prof. L. Gerritzen, Prof. H. Hartmann, Prof. H. Klein, Prof. K. H. König, Prof. W. Martienssen, Prof. G. Mauck, Prof. H. Müser, Prof. M. Reichert, Prof. W. Scheid, Prof. E. Schopper, Prof. F. Stummel, Prof. C. Toepffer und Prof. J. Weidmann.

Danksagung

Meinem Lehrer, Herrn Prof. Dr. Walter Greiner danke ich für die Anregung dieser Arbeit, für sein stetiges förderndes Interesse bei ihrer Entstehung und für viele Denkanstöße.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Berndt Müller für viele anregende Diskussionen und wertvolle Ratschläge. Die enge Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Gerhard E. Soff, dem ich auch für die Überlassung von Computerprogrammen zu danken habe, sei besonders erwähnt.

Allen Kollegen am Institut für Theoretische Physik, insbesondere den Herren Wilfried Betz, Dr. Jürgen Hofmann, Johannes Kirsch, Wolfgang Schäfer und Dr. Horst Stöcker sowie Herrn Dr. Volker Oberacker (z. Zt. Oak Ridge, USA) danke ich für die langjährige freundschaftliche Zusammenarbeit.

Besonderen Dank schulde ich Frau B. Utschig sowie Frä. G. Roth für die sorgfältige Anfertigung der Zeichnungen und Herrn W. Brose für den schnellen Druck der Arbeit.

Die benötigte Computerzeit wurde vom Rechenzentrum der Gesellschaft für Schwerionenforschung (Darmstadt) zur Verfügung gestellt.

